

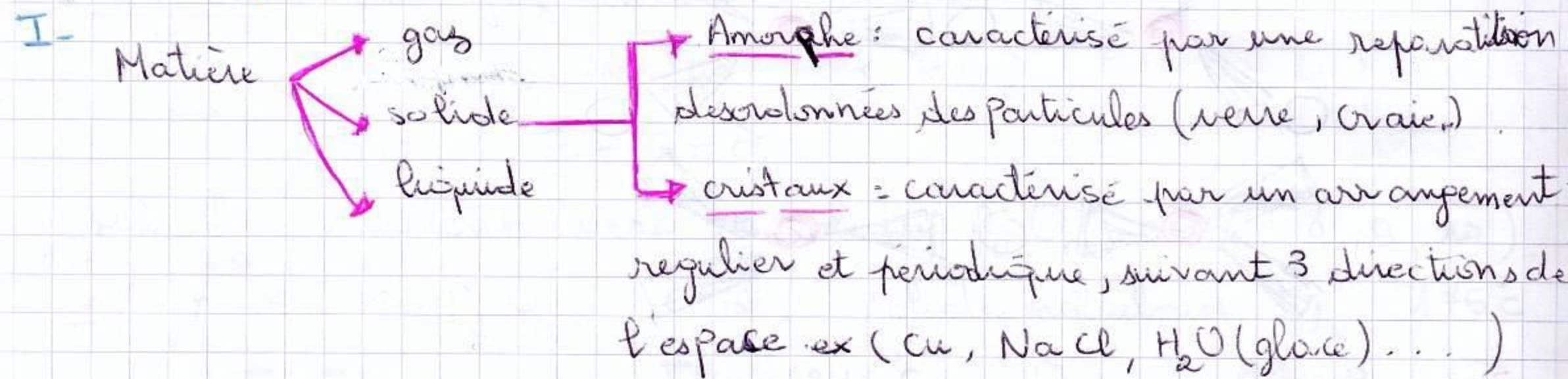
*~# Next Step*

**TOUT LE COURS  
DE CHIMIE MINÉRALE**

*Handwriting*



# Chp IV : cristallochimie =



## Remarques :

- 1- La caractéristique fondamentale d'un cristal est l'ordre
- 2- Les cristaux diffractent le rayon X.
- 3- particules : Atomes, ions simples, ions complexes, molécules.

## II - Le réseau :

- Un réseau ponctuel tridimensionnel est un arrangement triperiodique de points
- et tout point O d'un réseau, on peut faire correspondre une infinité de points possédant le même environnement
- pour obtenir l'ensemble de ces points, il suffit de faire subir au point O la translation

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \text{ avec } (u, v, w) \in \mathbb{Z}.$$

et  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  : vecteurs de base

- L'ensemble de ses points forment le réseau ponctuel.
- a, b et c sont les périodes du réseau  $\leadsto$  plus petite translation possible dans le réseau.
- $|\vec{a}| = a$  période suivant la direction de x
- $|\vec{b}| = b$  " " " " "
- $|\vec{c}| = c$  " " " " "



### 1 - Les nœuds d'un réseau :

Les points du réseau sont appelés **nœuds**.

### 2 - Une rangée réticulaire :

Un ensemble de nœuds alignés constituent **une rangée réticulaire**.

- La distance entre deux nœuds consécutifs d'une rangée est appelée **période de la rangée**.

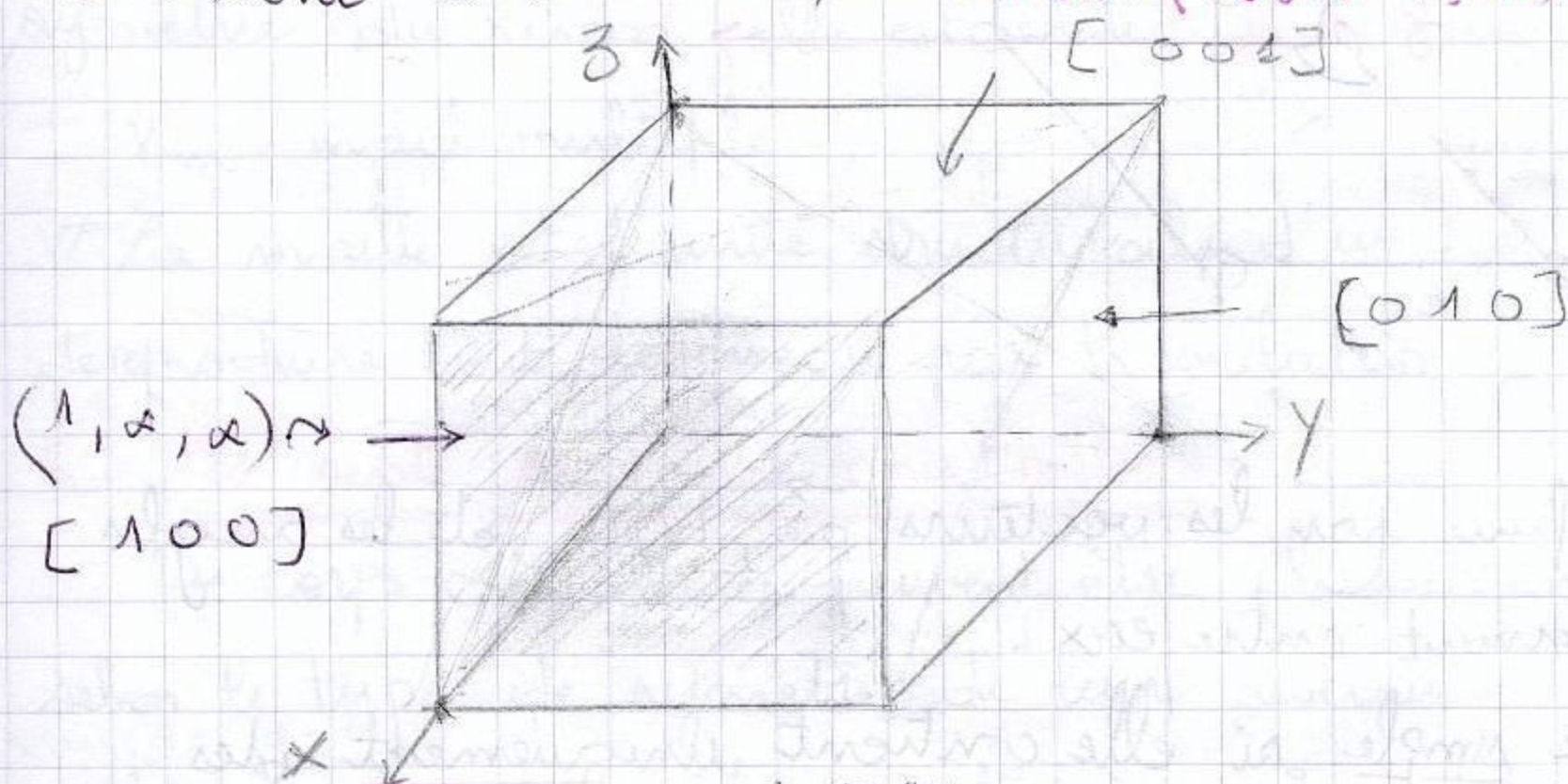
- Un ensemble de rangées réticulaires parallèles forment **une famille de rangées réticulaires**.

### 3 - Le plan réticulaire :

- Tout plan passant par 3 nœuds non situés sur une même rangée est un plan réticulaire.

- Un ensemble de plans réticulaires parallèles forment **une famille de plans réticulaires**.

- Un plan réticulaire est repéré par le triplet  $(h, k, l)$  où  $h$ ,  $k$  et  $l$  sont les indices de **Miller** (voir T.D).



ex:  $(1, 3, \frac{1}{4}) \xrightarrow{\text{inverser}} (1, \frac{1}{3}, 4) \xrightarrow{\times 3} (3, 1, 12) \rightarrow [3 \ 1 \ 12]$

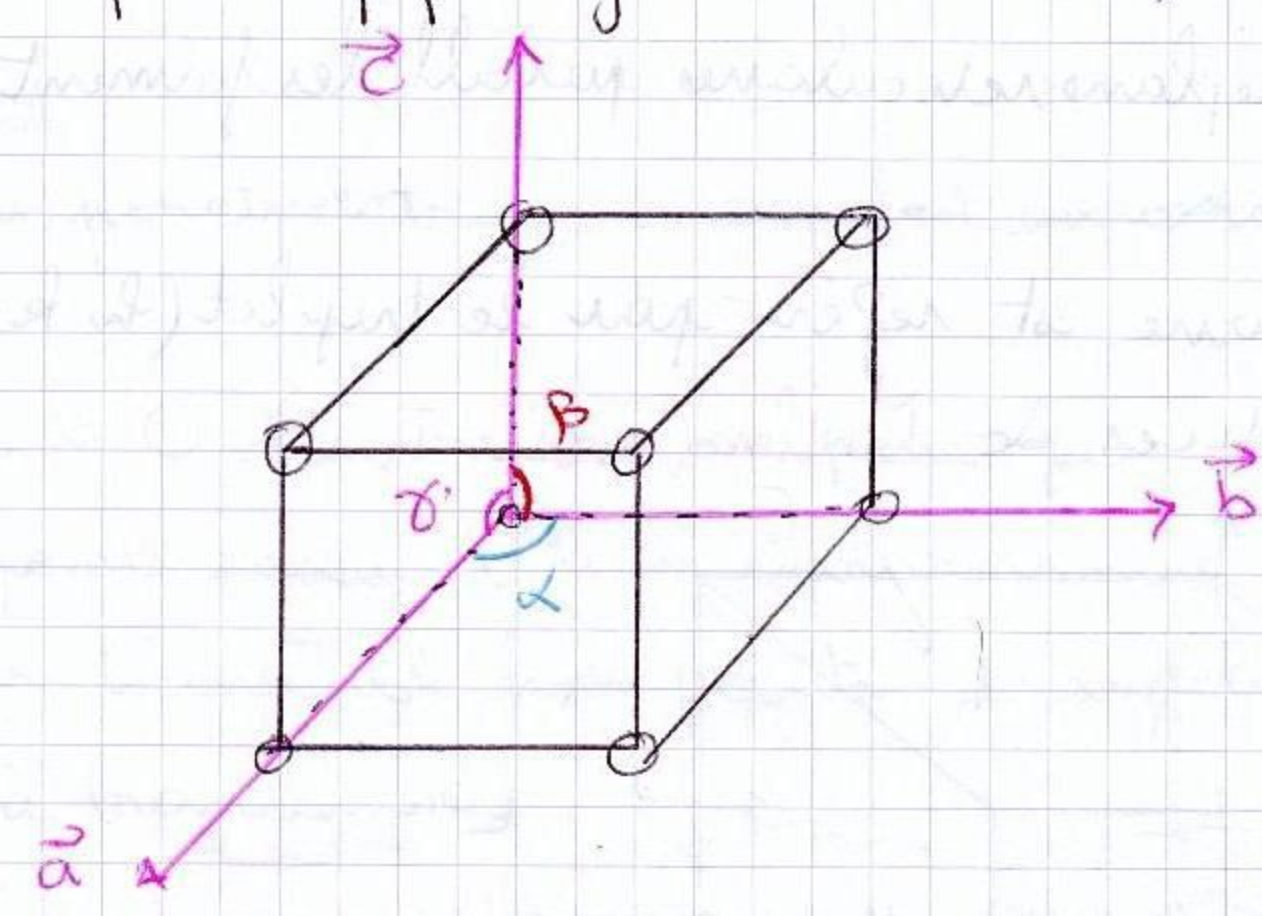


4. le motif: Le réseau cristallin ou structure cristalline, ou structure cristalline est un réseau dans lequel les nœuds sont occupés par des particules. Le plus petit ensemble de particules qui se reproduit indéfiniment de façon périodique et régulière est appelé motif de réseau.

Le motif peut être soit un atome, soit un ion simple ou complexe soit une molécule.

exp: atome (Cu), molécule (NaCl) ...

5. la maille: Une maille est un parallépipède qui construit par 3 vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  non coplanaires et issus d'une même origine O, ce parallépipède joint 8 nœuds de réseau.



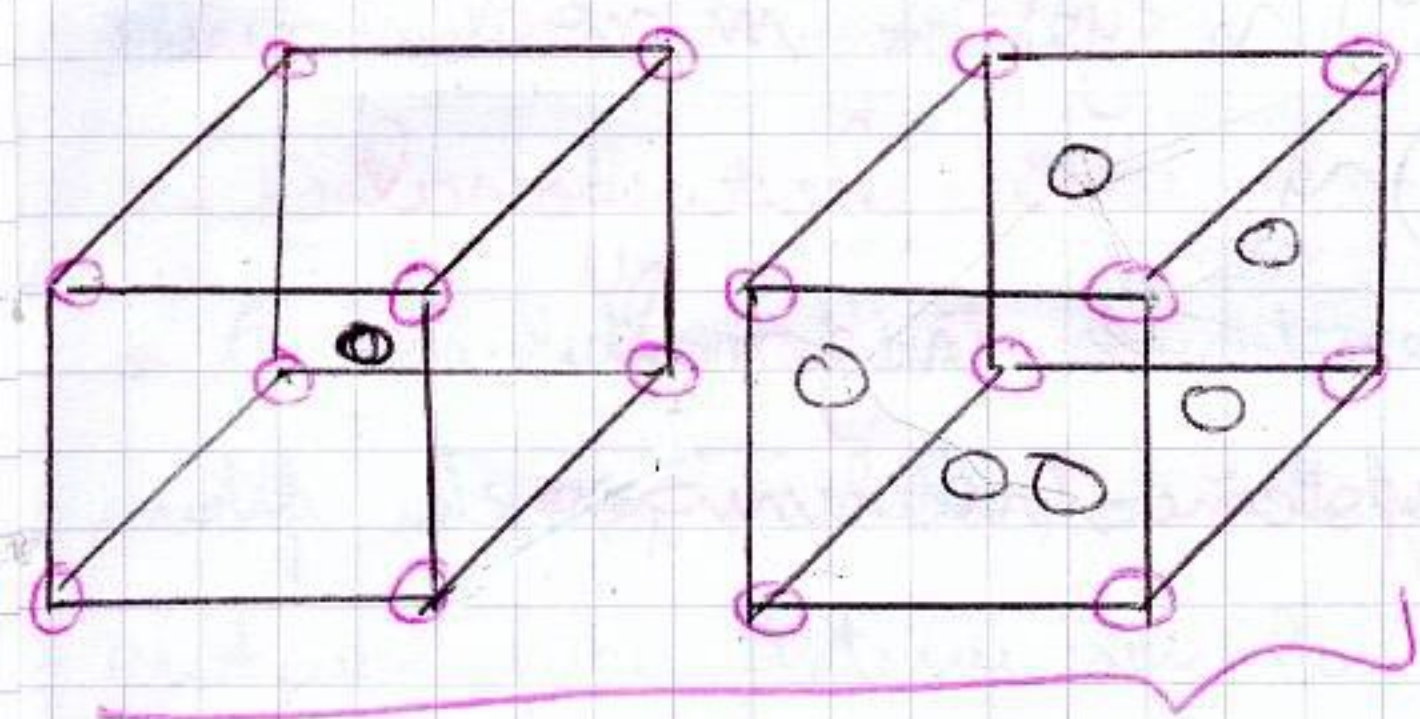
Une maille est définie par les vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  et les angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  qu'ils forment entre eux.

\* La maille est dite simple si elle contient uniquement les nœuds aux sommets.

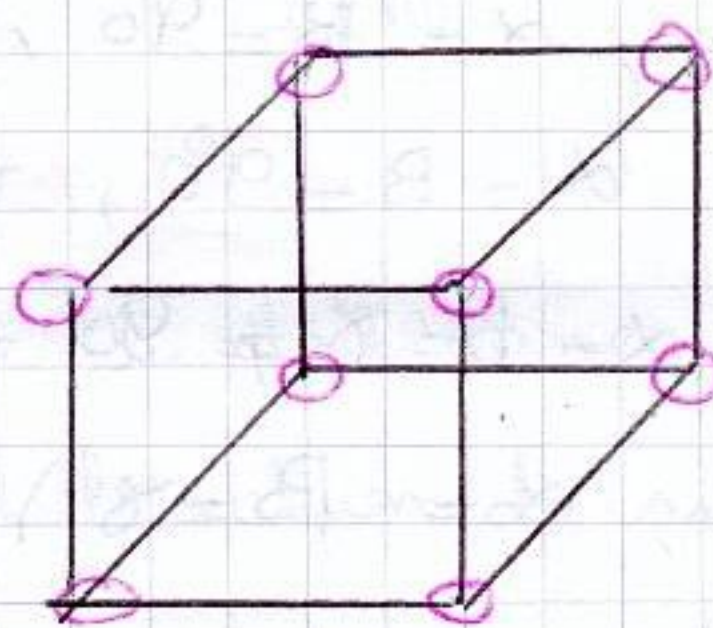
Elle est dite multiple si elle contient en plus des nœuds sur sa surface ou dans son volume.

exp:





multiple



simple

### Remarques :

i/ Le choix de la maille, tout comme celui de l'origine est arbitraire.

ii/ on choisit des mailles multiples pour faire apparaître les éléments de symétrie du réseau. La plus petite maille multiple ayant la symétrie du réseau est dite élémentaire.

iii)  $V_m = m V_0 \Rightarrow m$  : multiplicité (voir TD)

iv/ Dans le cas où la maille simple suffit à décrire la symétrie du réseau, elle est dite primitive.

$V_m$  : maille multiple,  $V_p$  : maille primitive.

v/ La maille est l'unité structurale d'un réseau. Elle permet de reproduire tout le réseau par translation.

### 6 - Les sept systèmes cristallins :

Les corps cristallisés peuvent être classés en 7 systèmes cristallins selon le type de symétrie de leur réseau.

Le classement a été effectué à partir des mailles primitives, par comparaison des modules des vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  et des angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  qu'ils forment entre eux.

1-  $(a = b = c, \alpha = \beta = \gamma) \Rightarrow$  système cubique.

2-  $(a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ) \Rightarrow$  // tétragonal.

3-  $(a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ) \Rightarrow$  // orthorhombique.



- 4- ( $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma \neq 120^\circ$ )  $\leadsto$  système monoclinique
- 5- ( $a = b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ )  $\leadsto$  // rhomboédrique
- 6- ( $a = b = c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$ )  $\leadsto$  // trigonal.
- 7- ( $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma$ )  $\leadsto$  système triclinique.
- (voir Tableau)

### 7- Les quatorze réseaux de Bravais :

Bravais a émis 3 conditions :

- i/ La symétrie de la maille doit être la même que celle du réseau
  - ii/ Le n<sup>bre</sup> d'angles droits  $\perp$  entre les arêtes doit être maximal.
  - iii/ En gardant les 2 premières conditions, le volume de la maille doit être minimal  $\Rightarrow$  D'où l'existence de 4 types de Mailles.
- primitive : formée uniquement de sommets, notée **P** ou **R** (1 motif par maille)
  - Centrée : qui contient au plus de 8 sommets un motif au centre notée **I** (2 motifs / maille)
  - A bases centrées : en plus de 8 sommets, 2 bases sont occupées notées **A**, **B** ou **C** (2 motifs / mailles)
  - A faces centrées : notée **F** (4 motifs / maille)

L'association de ces modes aux 7 systèmes cristallins : 14 réseaux de Bravais (voir tableau).

N.B.  $\forall$  la maille on a :

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$



TABEAU N°1: LES 7 SYSTEMES CRISTALLINS



Distributions en  
atomes  
de cristaux

SYSTEME	Cubique	Hexagonal	Quadratique	Rhomboédrique	Orthorhombique	Monoclinique	Triclinique
P							
I							
C							
F							



### III - Notions Générales aux structures cristallines :

#### 1 - Détermination de la structure cristalline :

• La résolution d'une structure consiste à déterminer la position des motifs ou la maille, on utilise la diffraction du rayons X par les cristaux pour déterminer la structure.

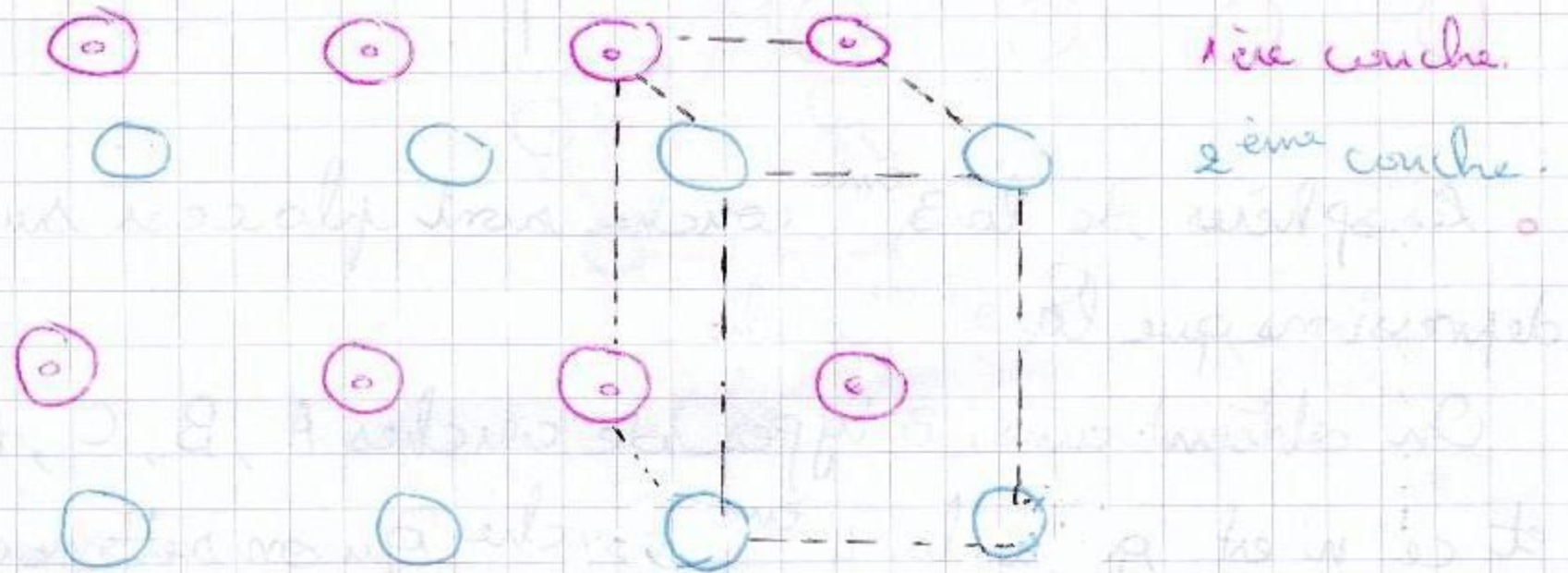
• Dans l'étude des structures on assimile les atomes et les ions à des <sup>sphères</sup> rigides et indéformables

#### 2 - L'assemblage des sphères :

Il y a 2 façons  $\neq$  d'assembler des sphères identiques dans l'espace pour obtenir une structure compacte :

Il faut disposer le plus grand nombre de sphère dans le plus petit espace possible

##### i - Assemblage carré :



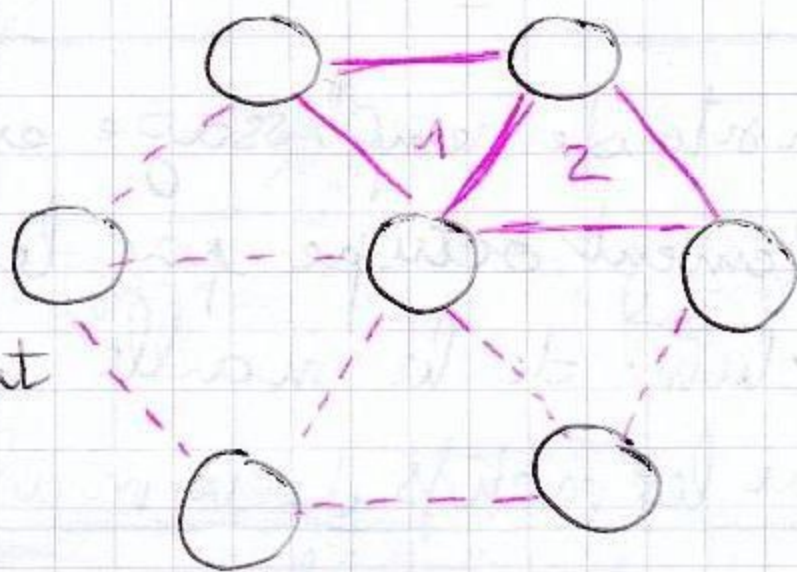
La 3<sup>ème</sup> couche coïncide avec la 1<sup>ère</sup> couche.

N.B. Cet empilement carré laisse bcp d'espace vide. Il ne correspond pas à l'empilement le plus compact possible.

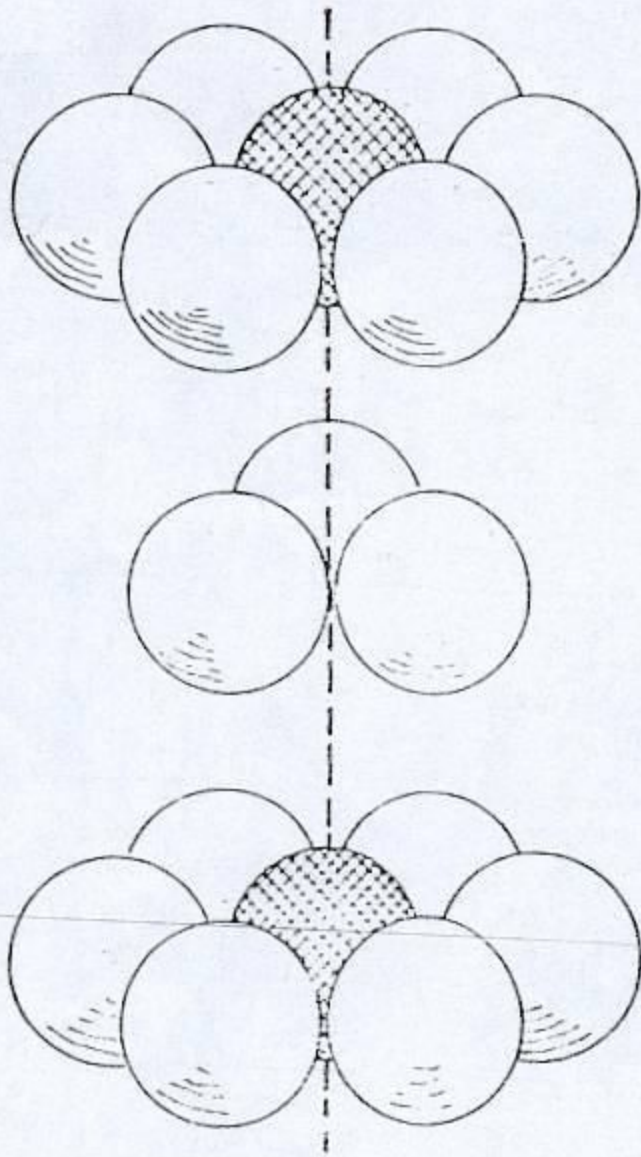
##### ii - Assemblage triangulaire :

$\nabla$  P.B  
pointe vers le bas

$\triangle$  P.H  
pointe vers le haut



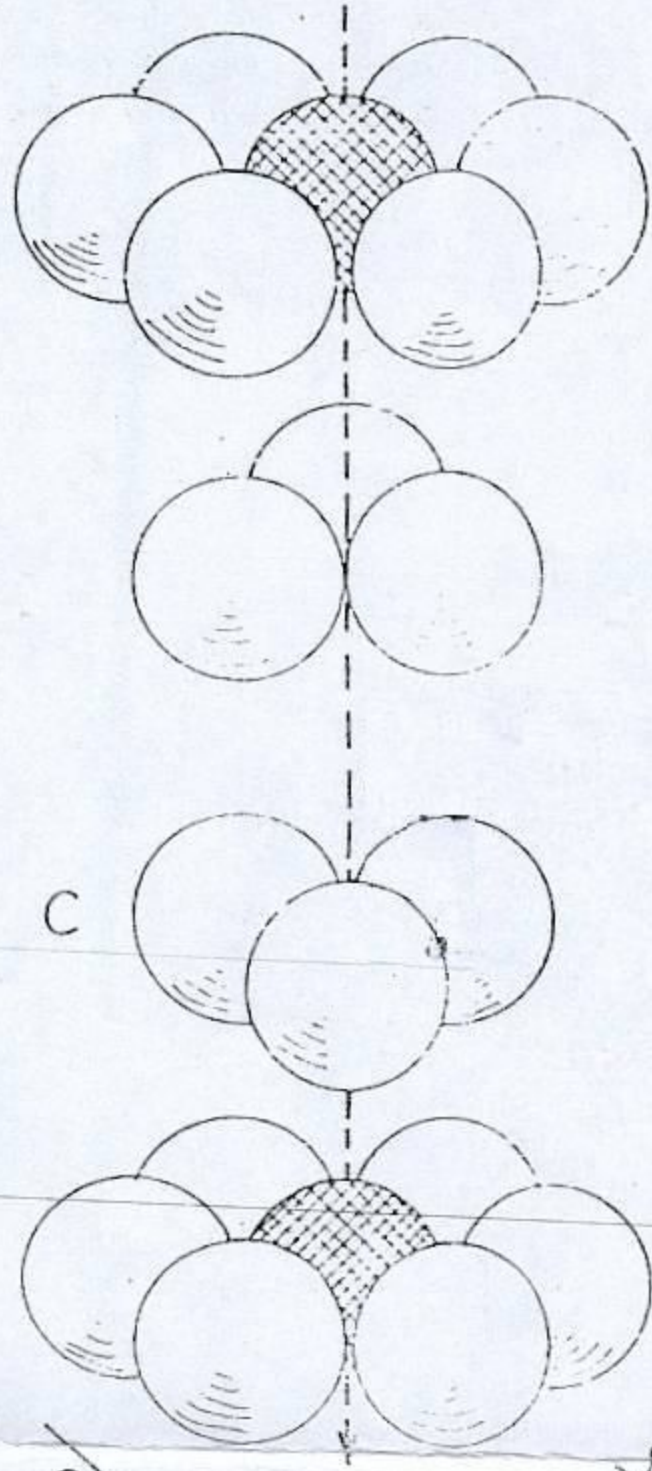




A

B

A



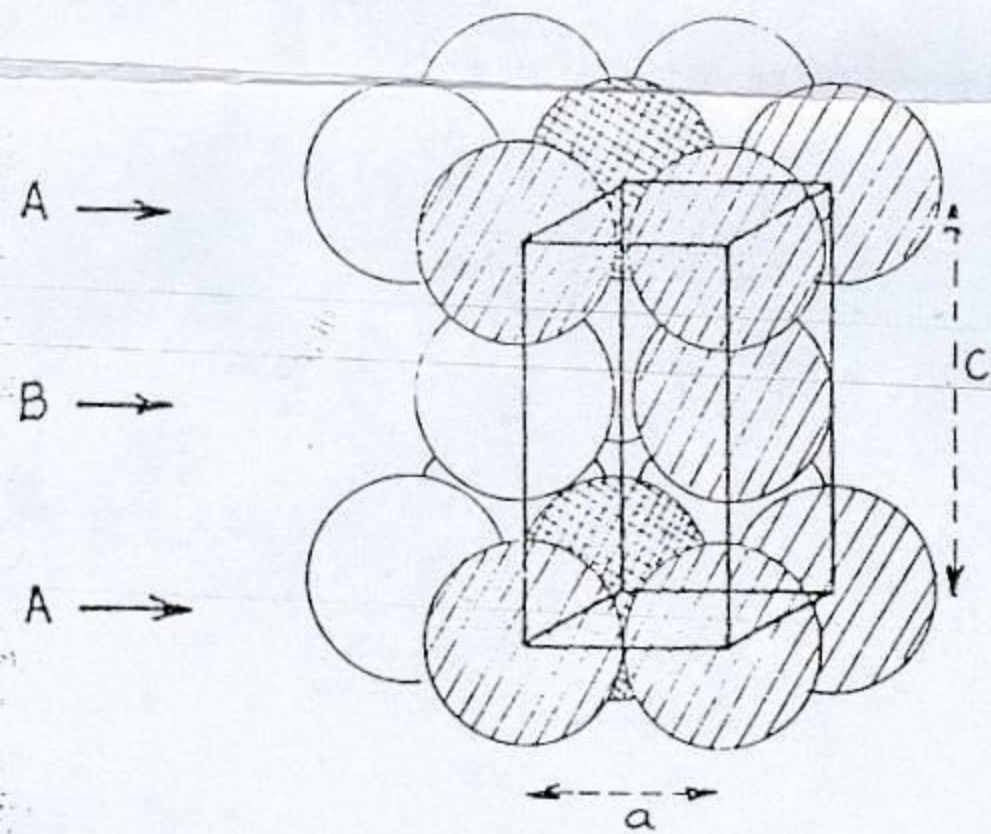
A

B

A

A

C



B

C

A

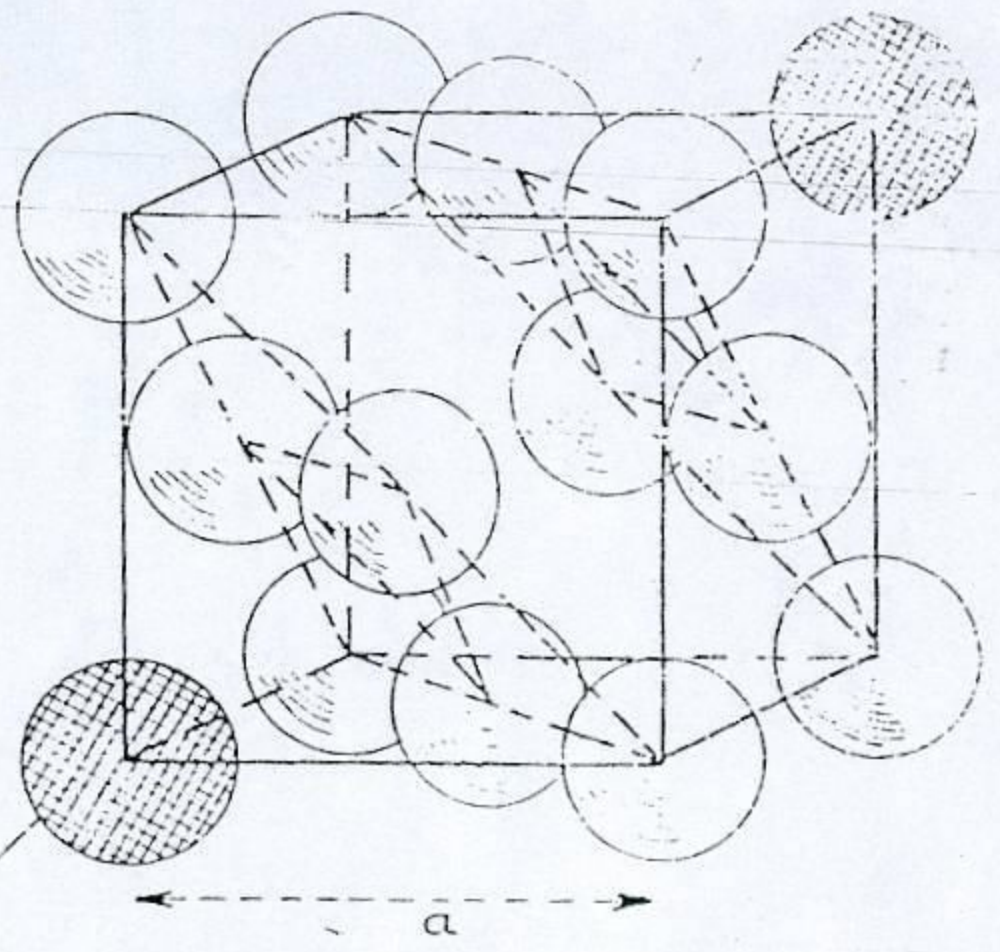


Figure n° 1 : Assemblages triangulaires

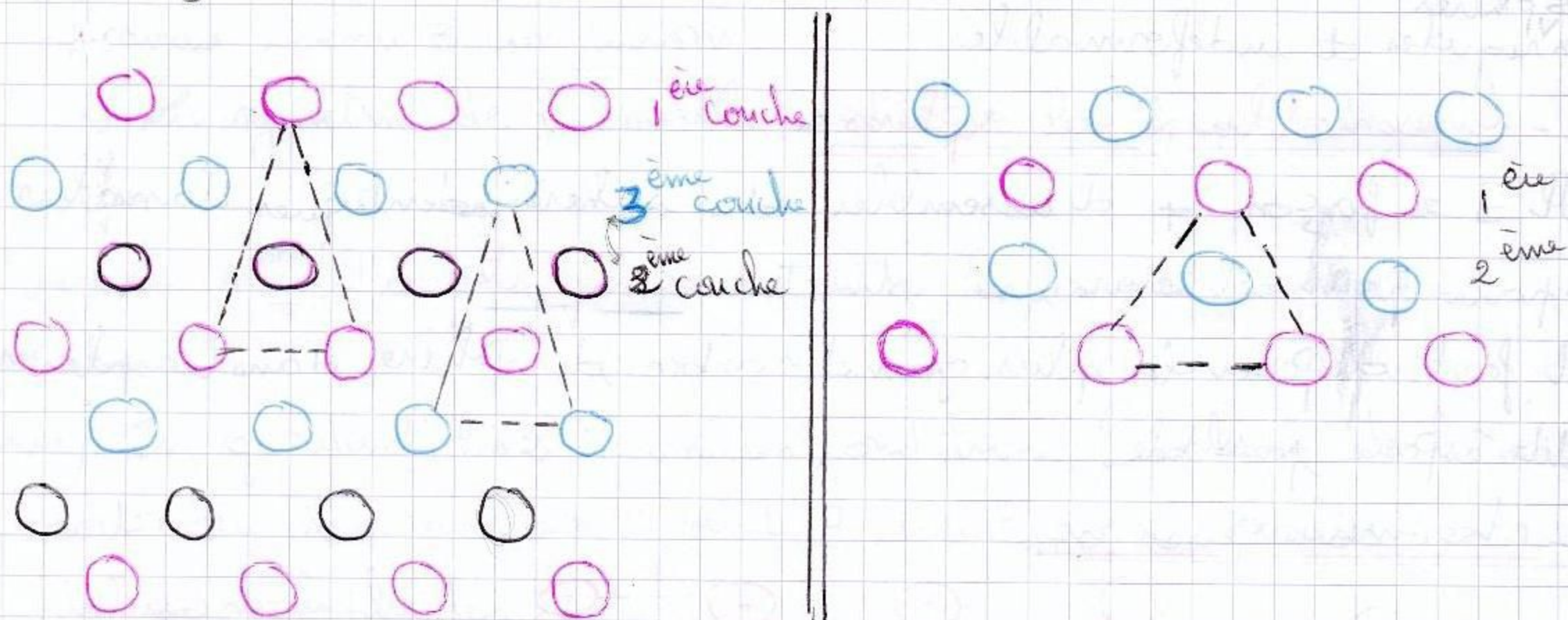


\* la 1<sup>ère</sup> couche étant constituée. Il y a 2 types de dépressions ou vides  $\Rightarrow$  donc 2 façons de placer les sphères de la 2<sup>ème</sup> couche.

• Dépressions pointées en bas marquées 1 et appelée **PB**

• // // // haut // 2 // // **PH**

\* Si l'on ajoute une 3<sup>ème</sup> couche aux deux précédentes, on peut envisager 2 possibilités:



• Les sphères de la 3<sup>ème</sup> couche sont placées sur les mêmes dépressions que la 2<sup>ème</sup> couche.

On obtient ainsi 3 types de couches A, B, C, A, B, C - - - et ce n'est qu'à la 4<sup>ème</sup> couche qu'on retombe sur la 1<sup>ère</sup> couche.

• Les sphères de la 3<sup>ème</sup> couche disposées sur des dépressions différentes de la 2<sup>ème</sup> couche (2<sup>ème</sup> couche PH, 3<sup>ème</sup> PB).

- Dans ce cas, à la 3<sup>ème</sup> couche, on retrouve la disposition de la 1<sup>ère</sup> couche. On obtient uniquement 2 types de couches (A, B, A, B, ...).

### 3 - La compacité:

La compacité  $C$  ou densité de remplissage est définie par le rapport de volume réellement occupé par les motifs appartenant à la maille au volume de la maille.

$$C = \frac{\text{Volume occupé par les motifs de la maille}}{\text{Volume de la maille}} \quad \begin{array}{l} C \text{ idéal} = 74\% \\ \Rightarrow 26\% \text{ vide.} \end{array}$$



4- Les sites : Dans les empilements compacts (assemblage triangulaire des sphères) la compacité est de 0,74 : 74% de l'espace est occupé par les atomes est 26% est constitué du vide.

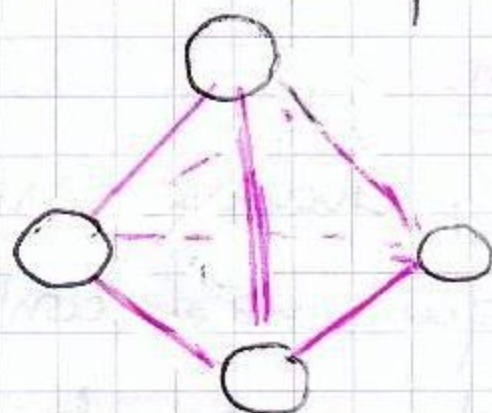
On distingue 2 types de cavités vides ou sites :

i - Les sites tétraédriques : délimités par 4 atomes (3 situés ds le m<sup>e</sup> plan et 1 dans un autre plan)

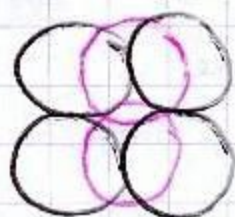
Forme compacte



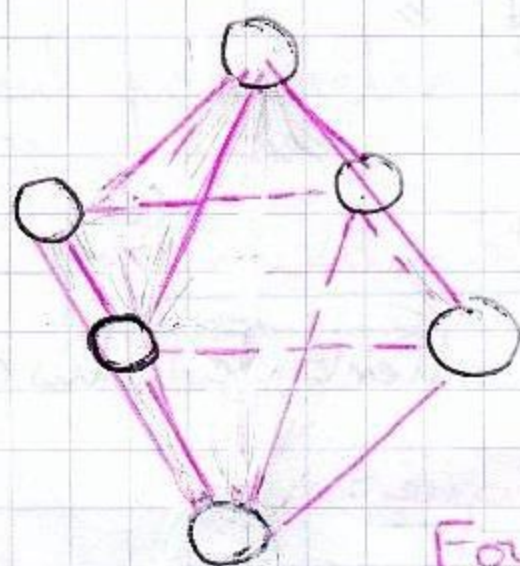
Forme écartée



ii - Les sites octaédriques : délimités par 6 atomes (4 atomes ds le m<sup>e</sup> plan, et 2 chacun dans 1 plan situé de part et d'autre du plan des 4 atomes).



Forme compacte

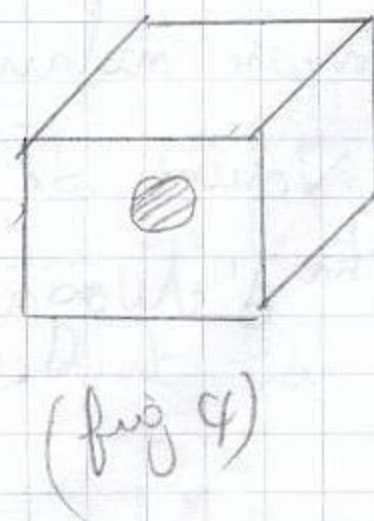
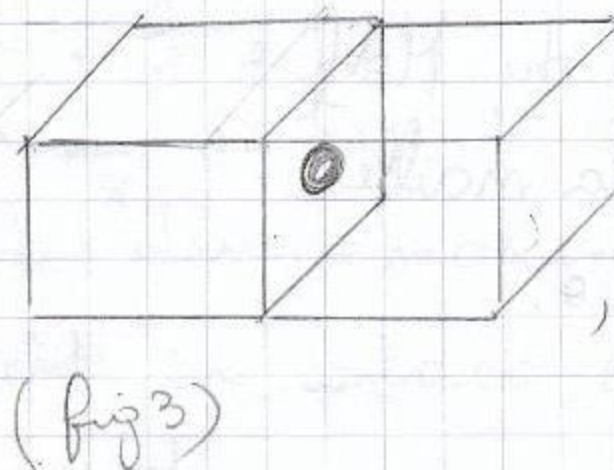
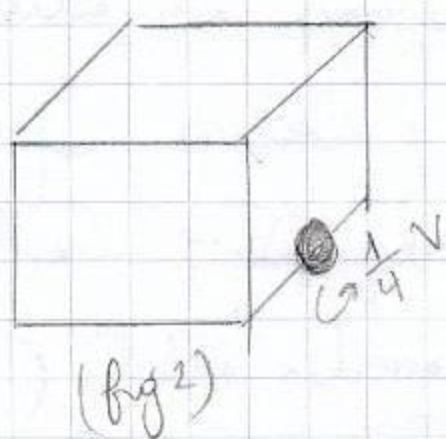
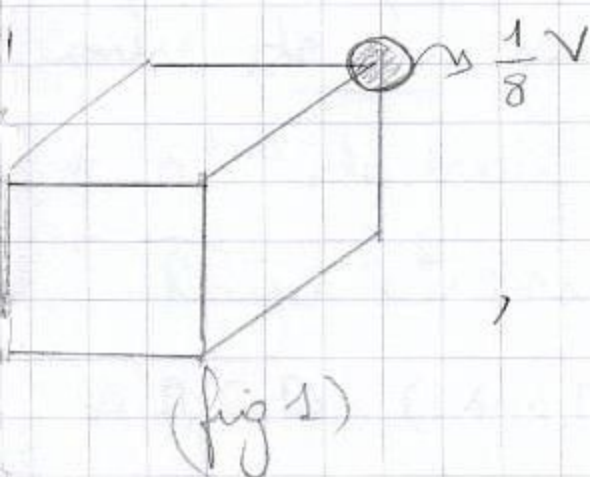


Forme écartée

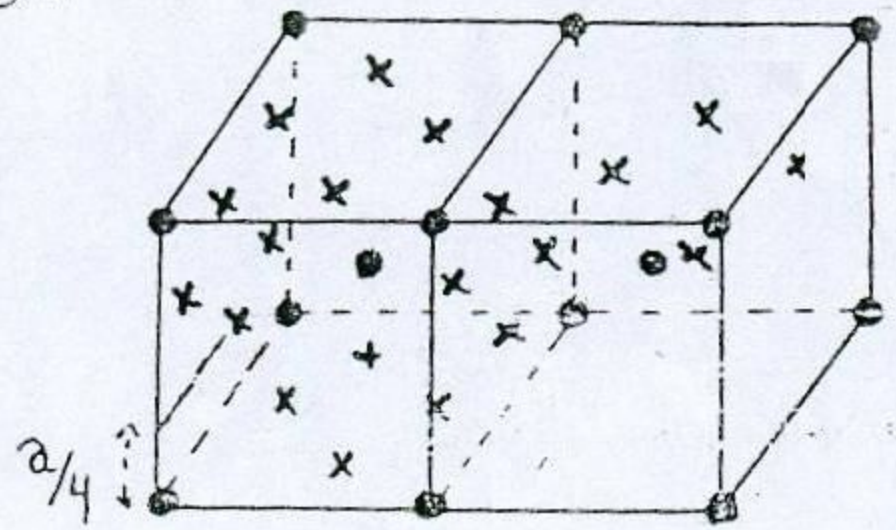
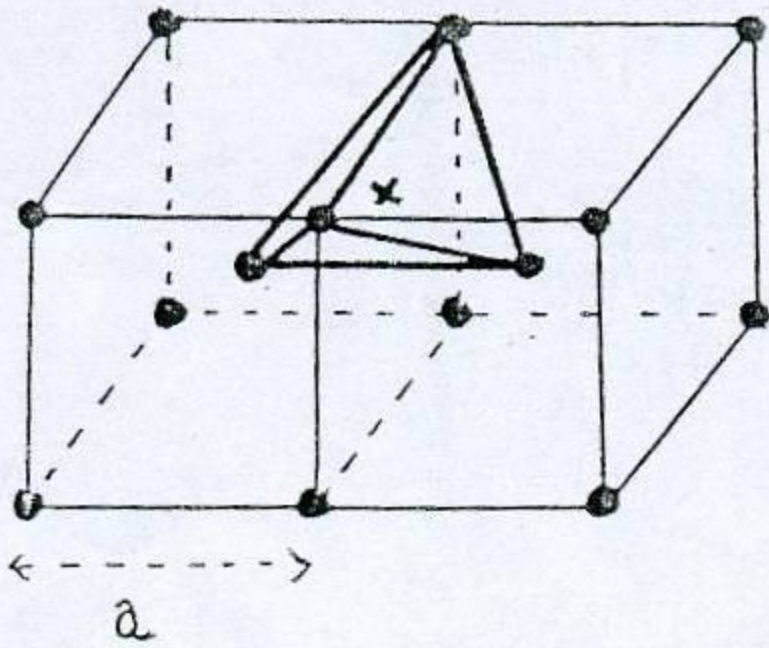
5- Nombre de motifs par maille :

En ce qui concerne la composition d'une maille

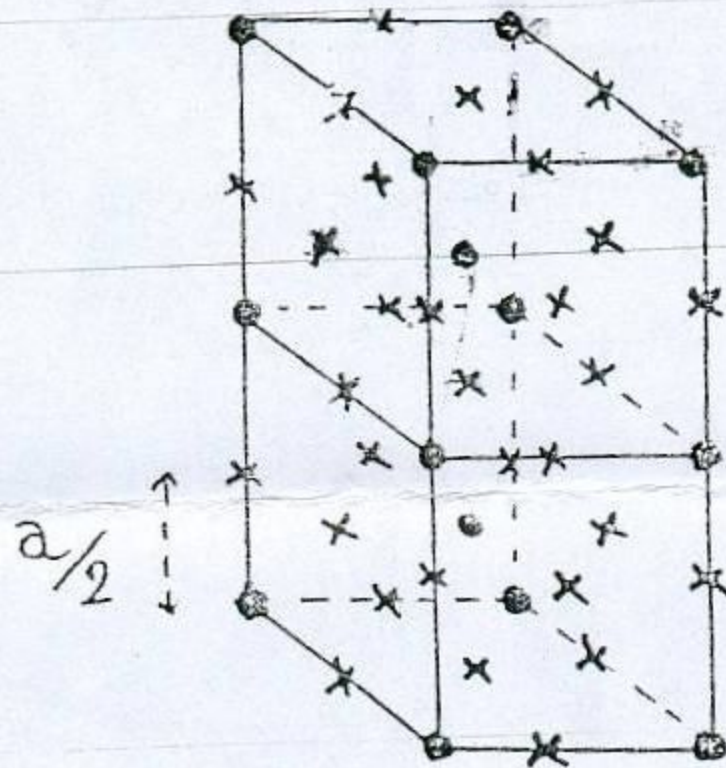
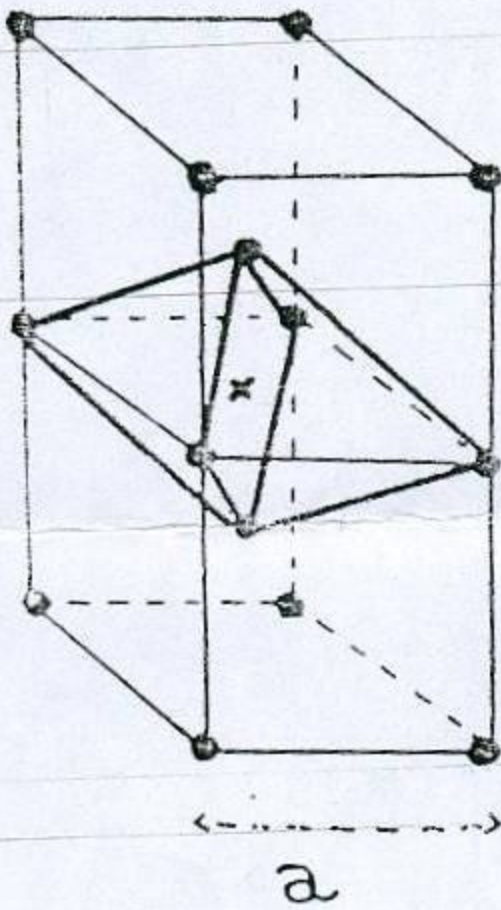
- Une particule placée si un noeud du sommet appartient à huit mailles et ne constitue que pour un huitième dans la maille (fig 1)







Sites tétraédriques



Sites octaédriques

Figure n° 2 : LOCALISATION DES SITES  
DANS LA STRUCTURE C.C.



- Une particule sur une arête est partagée entre quatre mailles et par suite ne contribue que par  $\frac{1}{4}$  dans la maille considérée (fig 2)
- Une particule située sur une surface est commune à deux mailles et ne contribue que par un demi dans la maille (fig 3)
- Une particule à l'intérieur de la maille, entièrement à la maille considérée et contribue par un dans la maille (fig 4)

## 6. Indice de coordination.

Dans un édifice cristallin, chaque particule (ion ou atome) est entourée de " $n$ " particules qui sont en contact avec cette dernière. Le nombre " $n$ " est "l'indice de coordination". on l'appelle parfois " $n^{\text{bre}}$  de coordination"

$n = 8$  : correspond à une coordination cubique.

$n = 6$  : correspond " " " " octaédrique.

$n = 4$  : " " " " tétraédrique.

## 7. plan de densité maximale :

C'est le plan qui contient le plus grand nombre de particules.

## 8. Masse volumique :

la masse volumique  $\rho$  est défini par le rapport de la masse réelle des motifs appartenant à la maille au volume de la maille. Elle s'exprime en  $\text{g/cm}^3$  :  $\rho = \frac{m \cdot M}{d \cdot v}$

$m$  :  $n^{\text{bre}}$  de motif / maille

$M$  : masse molaire du motif

$d$  : Volume de la maille

$N$  :  $n^{\text{bre}}$  d'Avogadro.



## IV - Structure métallique :

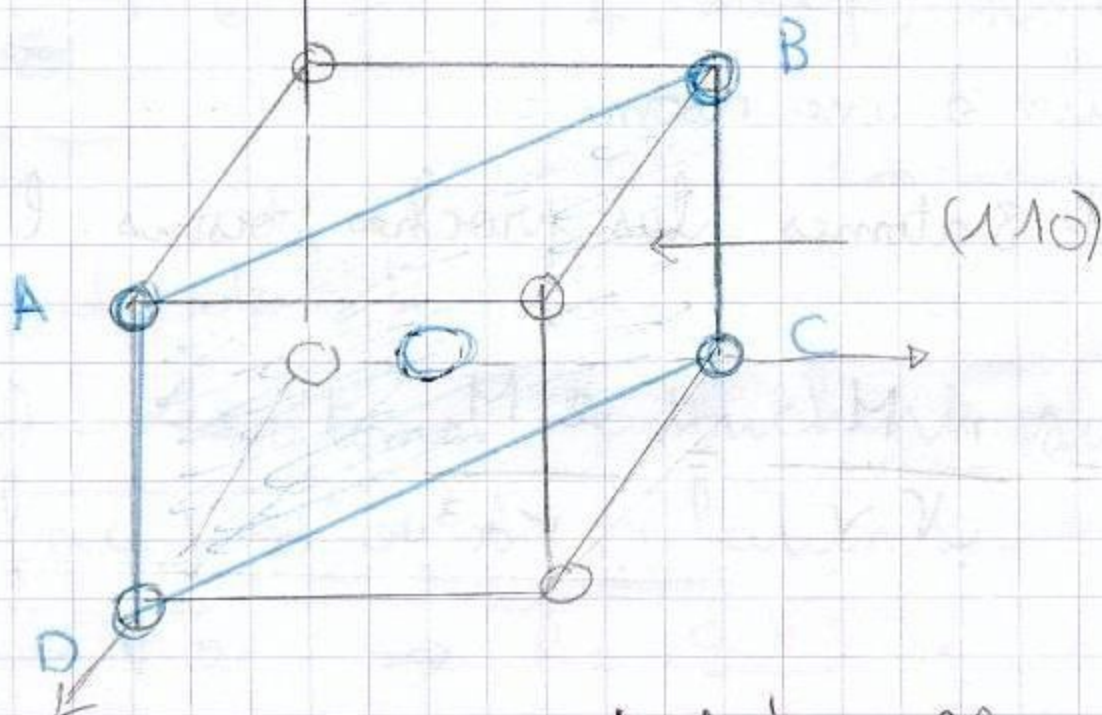
Les  $\frac{3}{4}$  des éléments de la classification périodique sont des métaux :  
Le métaux se distinguent des non-métaux par un certain nombre de propriétés physiques et chimiques : Conductibilité électrique, conductibilité thermique, malléabilité, ductibilité...

Les métaux cristallisent (90%) selon trois types de structures fondamentales.

- Cubique centré : C.C.
- Cubique à faces centrées : CFC.
- hexagonal compact : h.c.
- 1 motif correspond à un atome de l'élément considéré
- les motifs sont liés entre eux par des liaisons métalliques.

### 1 - Cubique simple centrée : CC

- la maille est définie par un seul paramètre "a" = arête du cube.

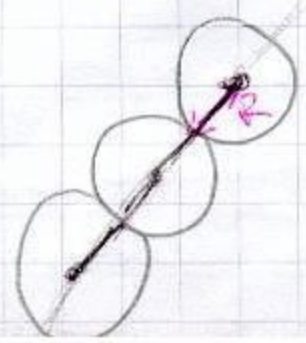


Cette structure correspond à l'assemblage : ccc...

Les atomes se trouvent aux sommets en position  $[0\ 0\ 0]$  et au centre de la maille en position  $[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]$ .

\* nombre de motif par maille :  $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$  atomes / maille

\* Rayon atomique : Le plan de densité maximale est le diagonal ABCD (110). Les atomes sont en contact suivant la diagonale du cube, d'où la relation :





$$BD^2 = DC^2 + CD^2$$

$$= 2a^2 + a^2 = 3a^2 \Rightarrow BD = a\sqrt{3}$$

$$BD = 4R \Rightarrow r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

\* compacité

$$* V_{\text{sphère}} = 2 \text{ atome} \times \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$* V_{\text{maille}} = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

pour un cube:  $a = b = c$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \alpha = \cos \beta = \cos \gamma = 0 \Rightarrow V_{\text{maille}} = a^3$$

$$* C = \frac{V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\frac{8\pi}{3} \left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\frac{8\pi}{3} \frac{a^3 3\sqrt{3}}{4^3}}{a^3}$$

$$C = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$$

\* Indice de coordination d'un atome:

Tout atome est entouré de 8 atomes plus proches voisins. l'indice de coordination est 8.

$$* \text{masse volumique: } \rho = \frac{nM}{N_A V} = \frac{zM}{N_A a^3}$$

$M$ : masse atomique.

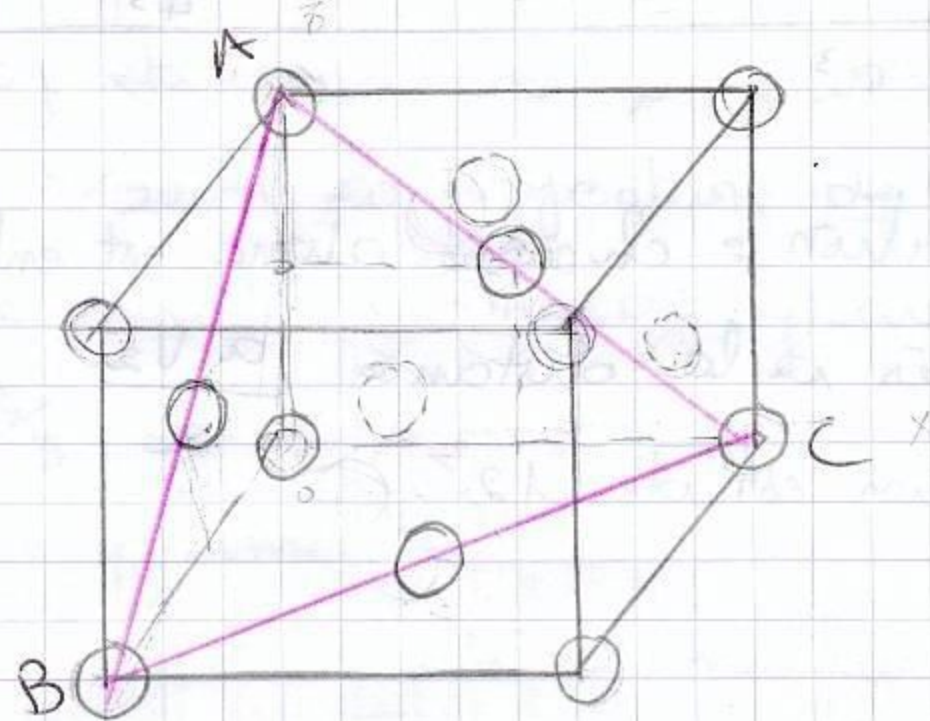
$N_A$ : n° de l'Avogadro.

$a$ : paramètre de la maille.

\* sites (Voir TD):



\* Cubique à face centrée = CFC



- Cette structure correspond à un assemblage triangulaire  
 - la maille est définie par un seul paramètre  $a$  = arête de la maille.

- Les atomes occupent les sommets en position  $[0\ 0\ 0]$  et les centres des faces en position  $[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0]$   $[\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}]$   $[0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]$ .

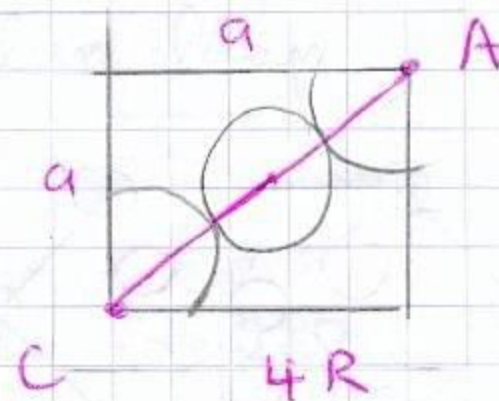
\* Nombre de motifs (multiplicité):

$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ motifs / maille}$$

\* Rayon atomique =

Le plan de densité maximale et le plan diagonal ABC.  
 $(1\ 1\ 1)$ . Les atomes se touchent suivant AB (diagonale de la face) d'où la relation:

$$4R = a\sqrt{2} \Rightarrow R = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$



\* Compacité:

$$* V_{\text{sphère}} = 4 \text{ atomes} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$* V_{\text{maille}} = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

un cube  $\Rightarrow V_{\text{maille}} = a^3$



$$C = \frac{V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi}{a^3} \frac{a^3 2 \sqrt{2}}{4^3} = \frac{\pi \sqrt{2}}{6} = 0,74$$

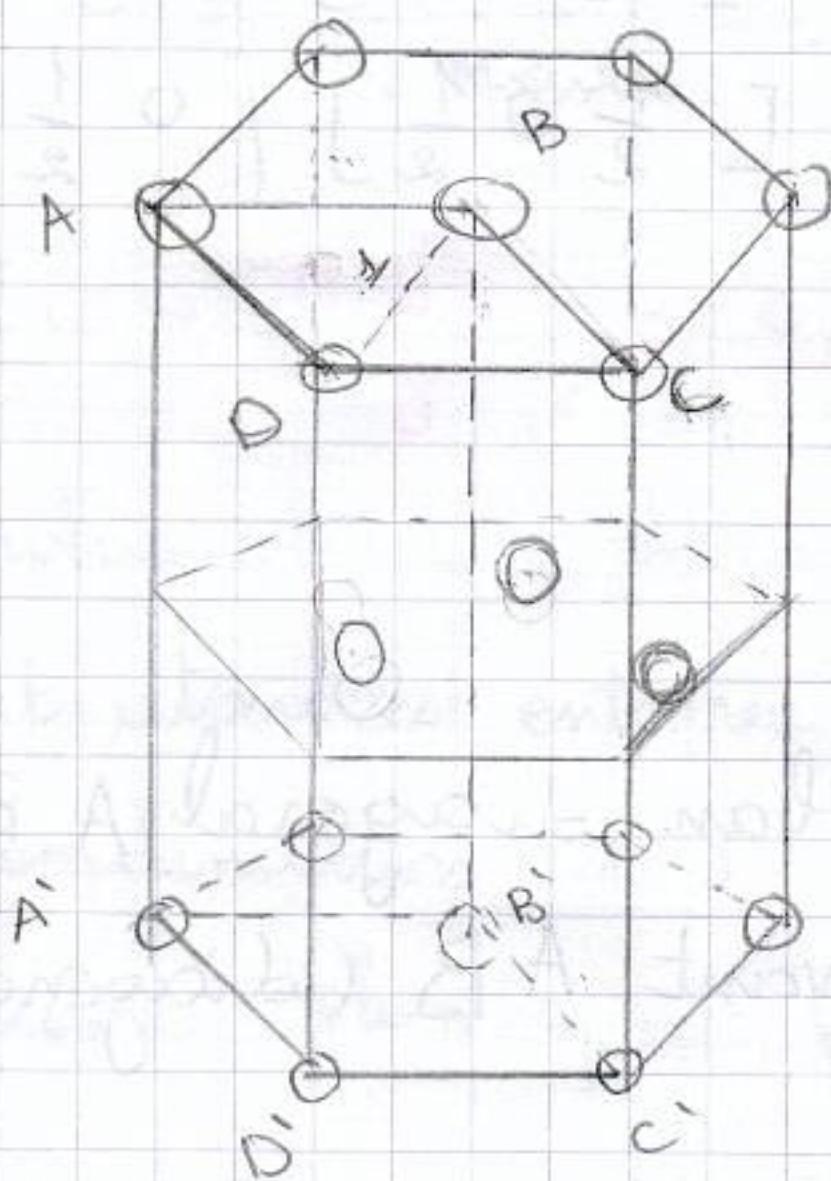
\* **Indice de Coordination** : chaque atome est entouré de 12 atomes premiers voisins situés à la distance  $\frac{a \sqrt{2}}{2}$  de l'atome considéré l'indice de coordination est de 12.

\* **Mass volumique** :

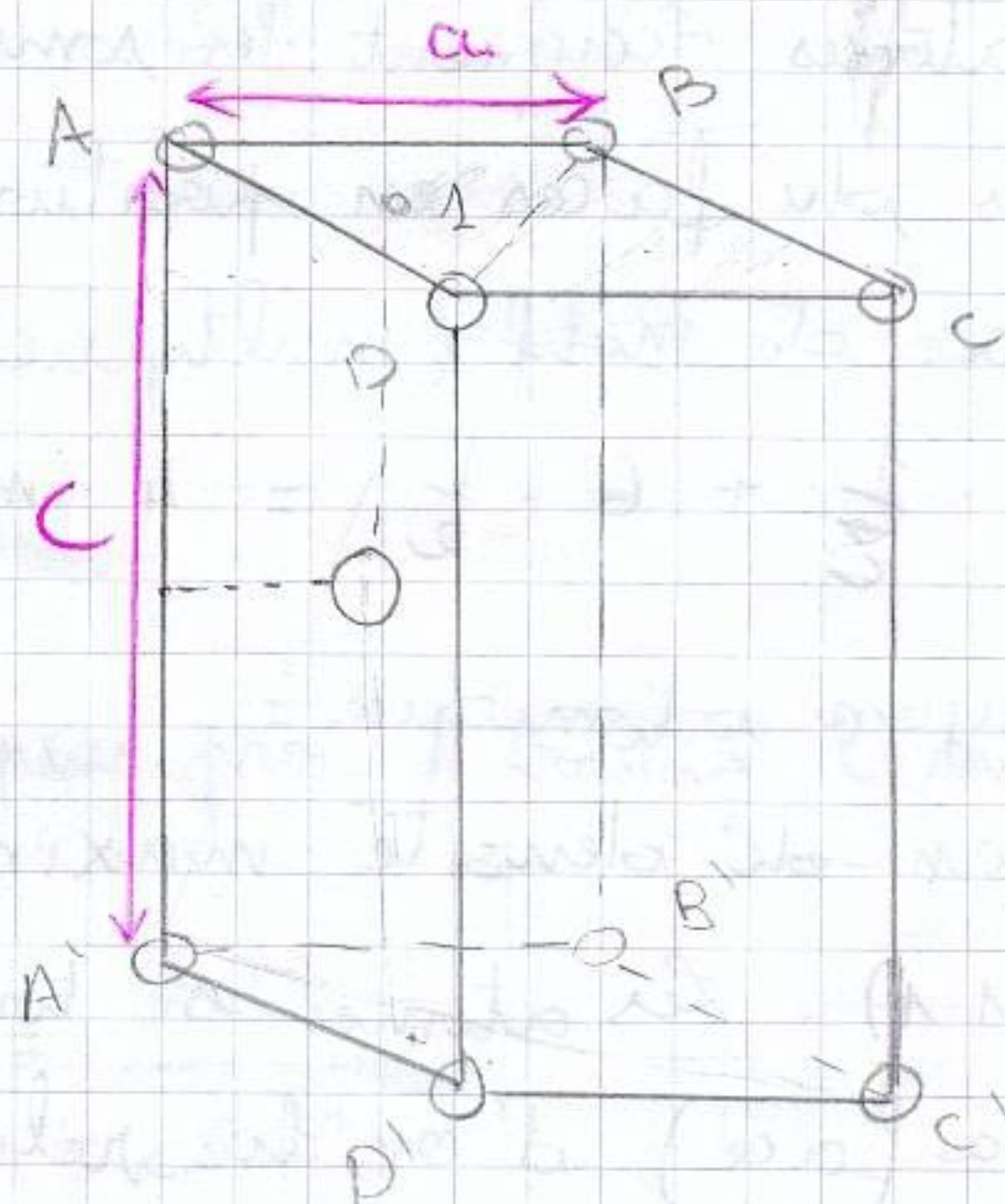
$$\rho = \frac{4M}{a^3}$$

\* **Sites** (voir T.D)

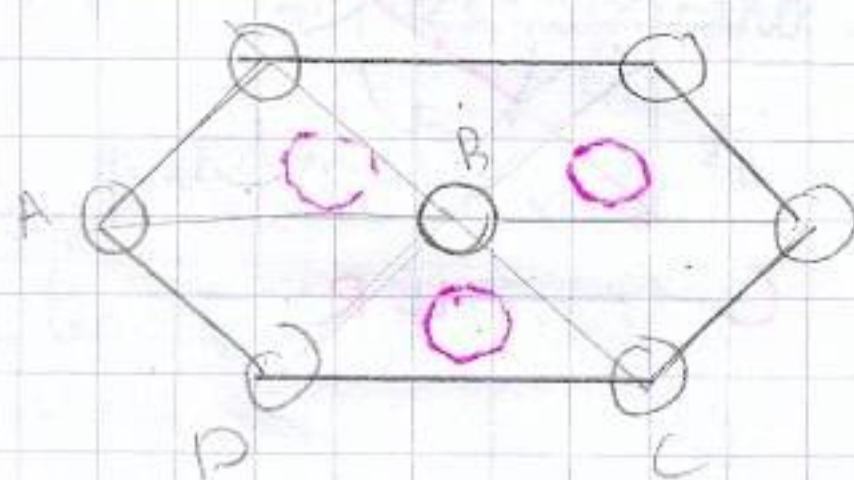
3 - **Hexagonal Compact** = H.C



maille multiple



maille simple



- Cette structure correspond à un empilement triangulaire où les atomes sont disposés une fois sur les p.H et une fois sur p.B.
- La maille est définie par 2 paramètres  $a$  = côté de losange de base et  $c$  hauteur de la maille.



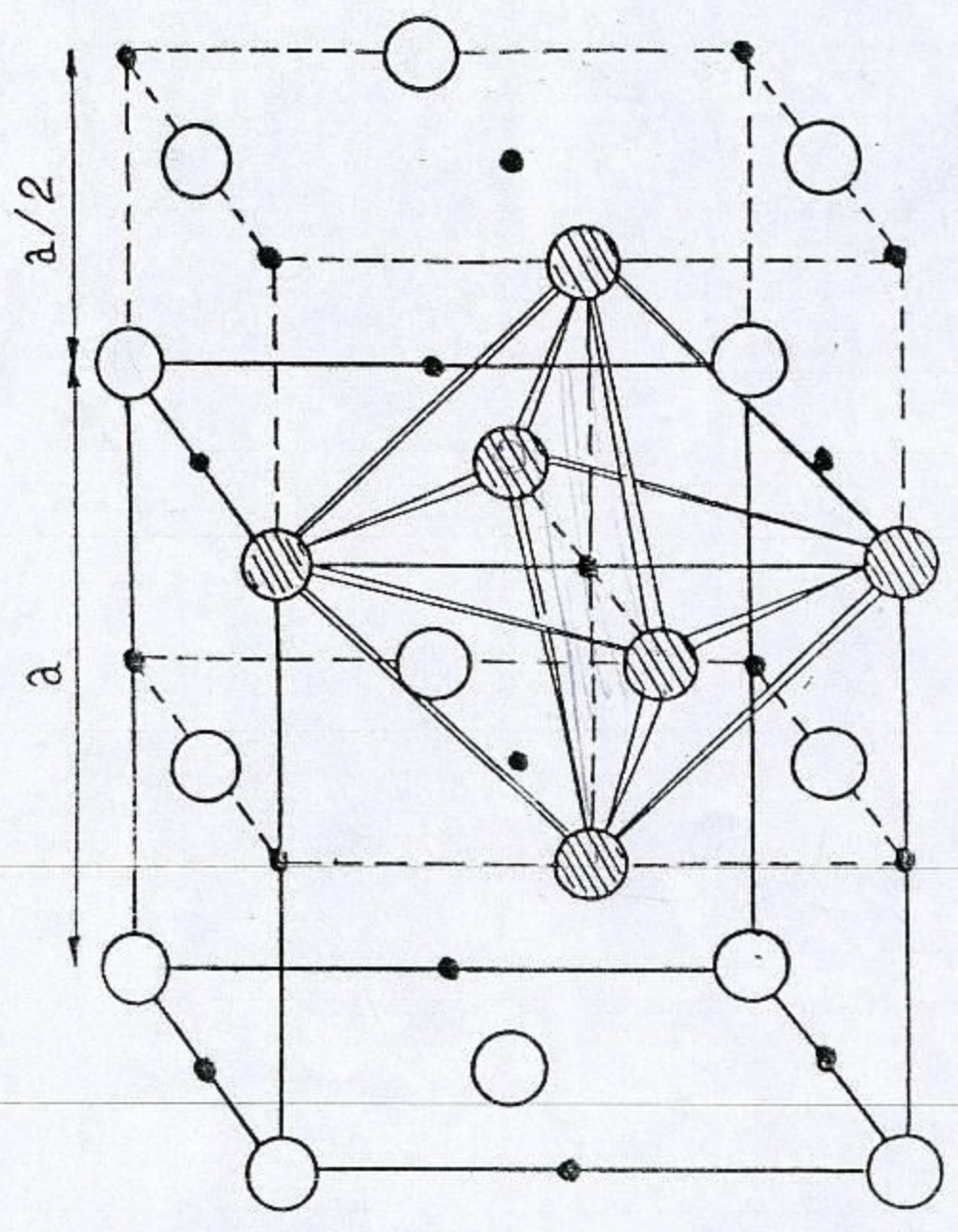
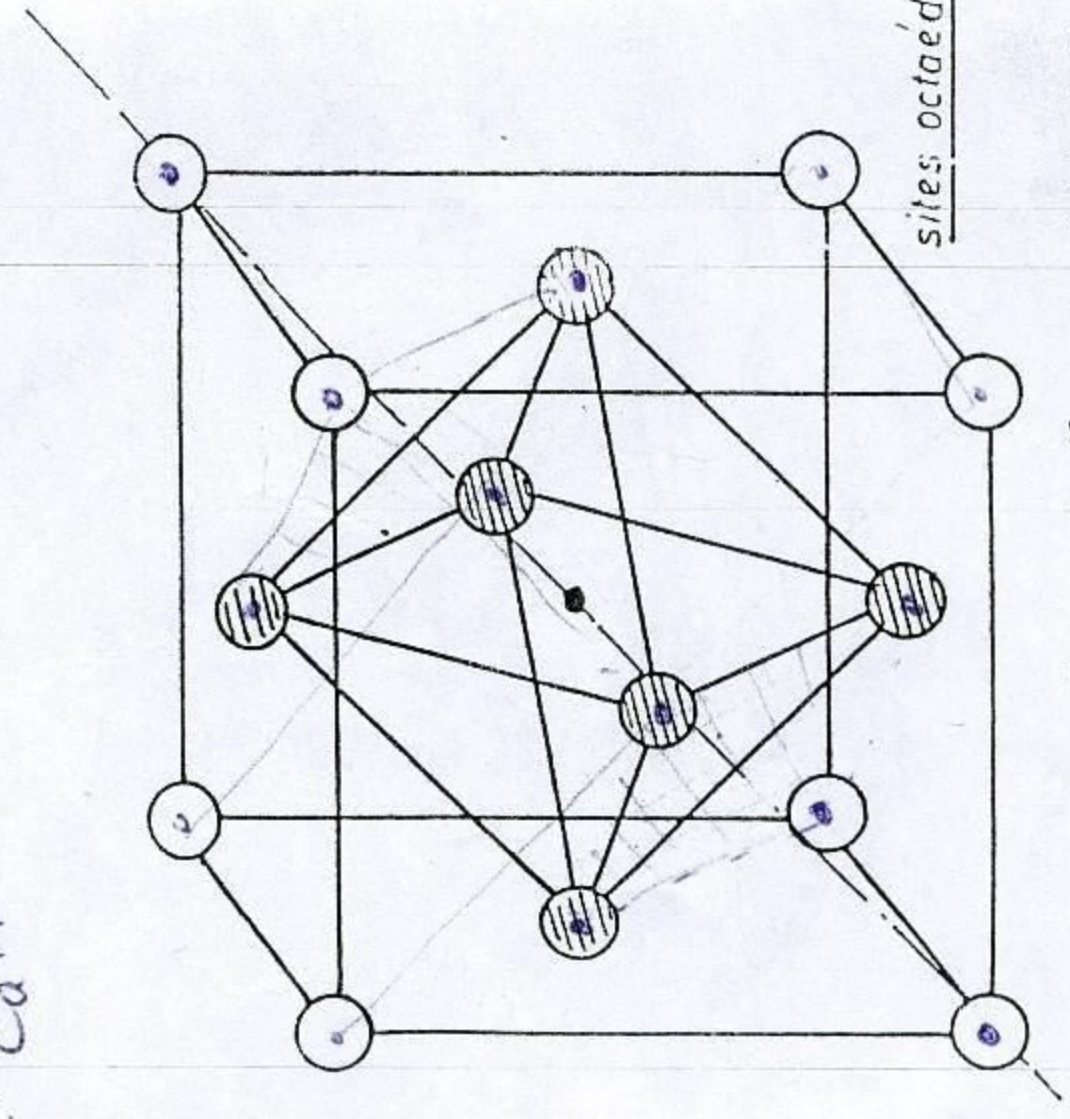
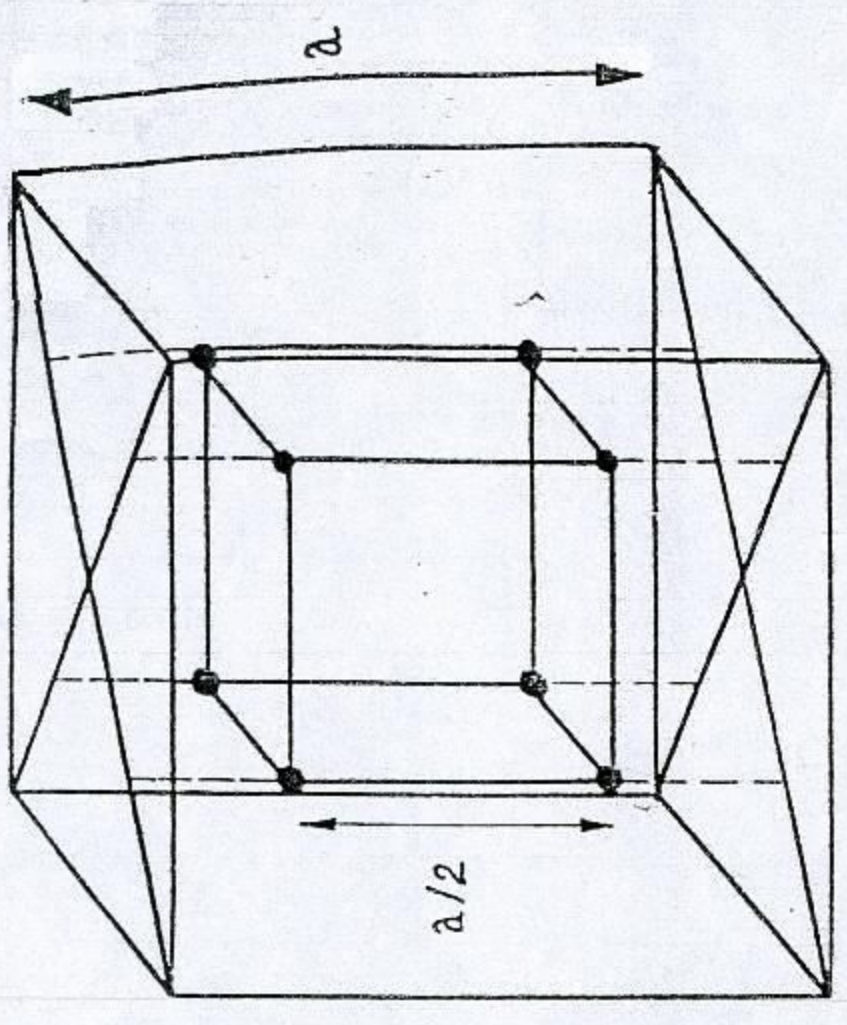
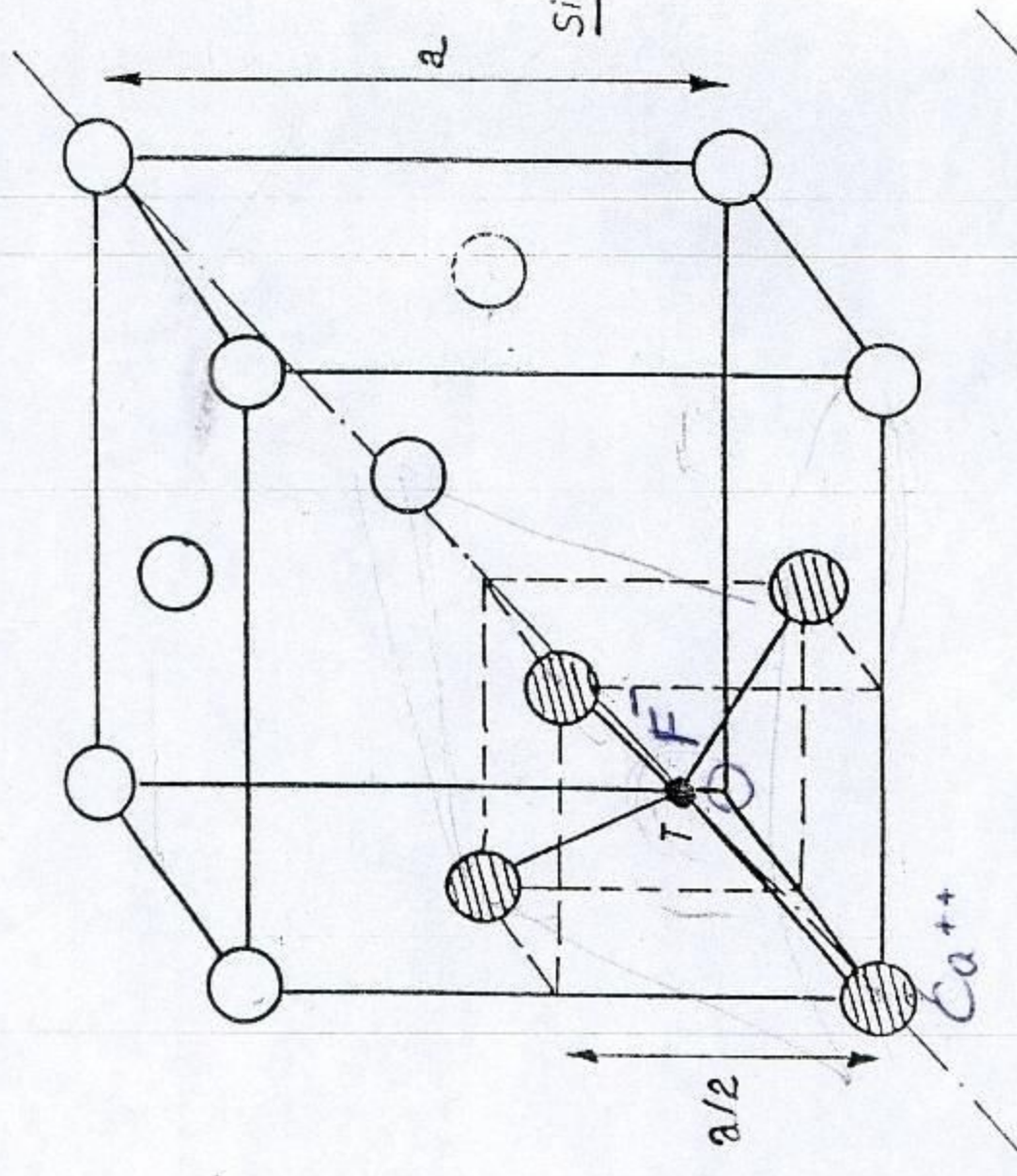
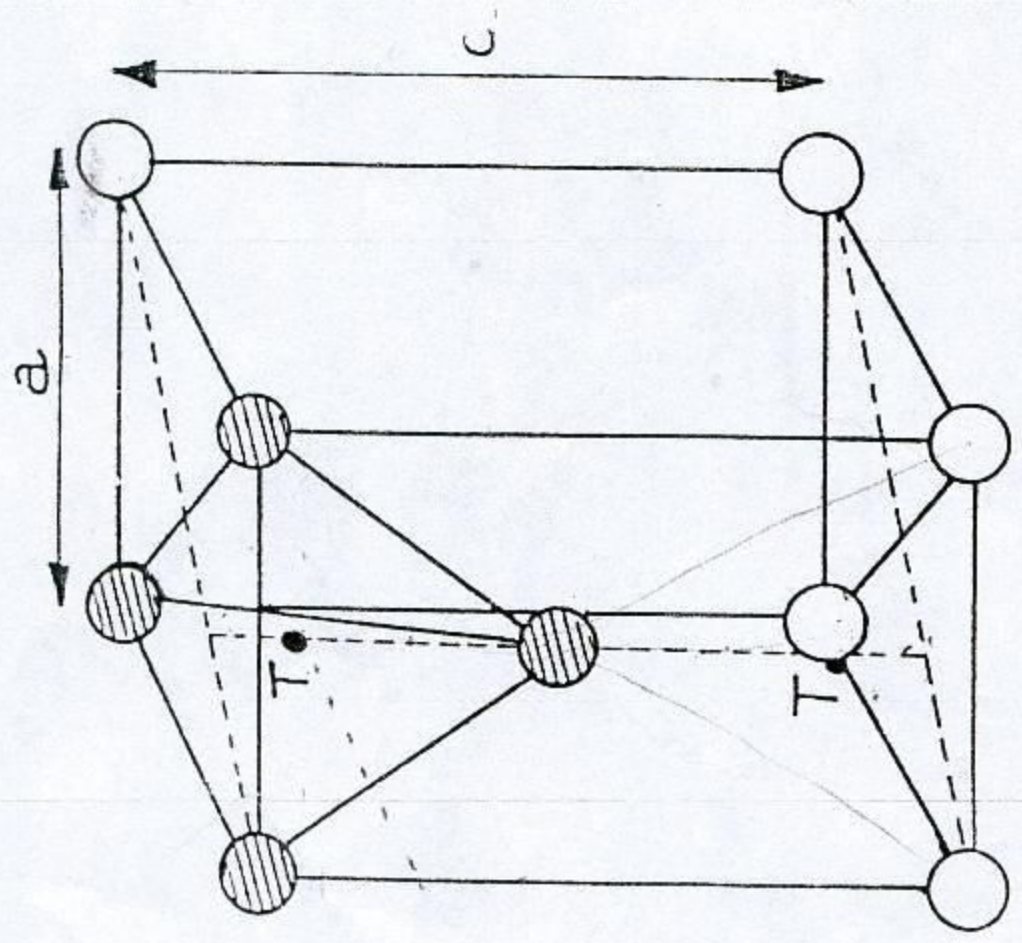
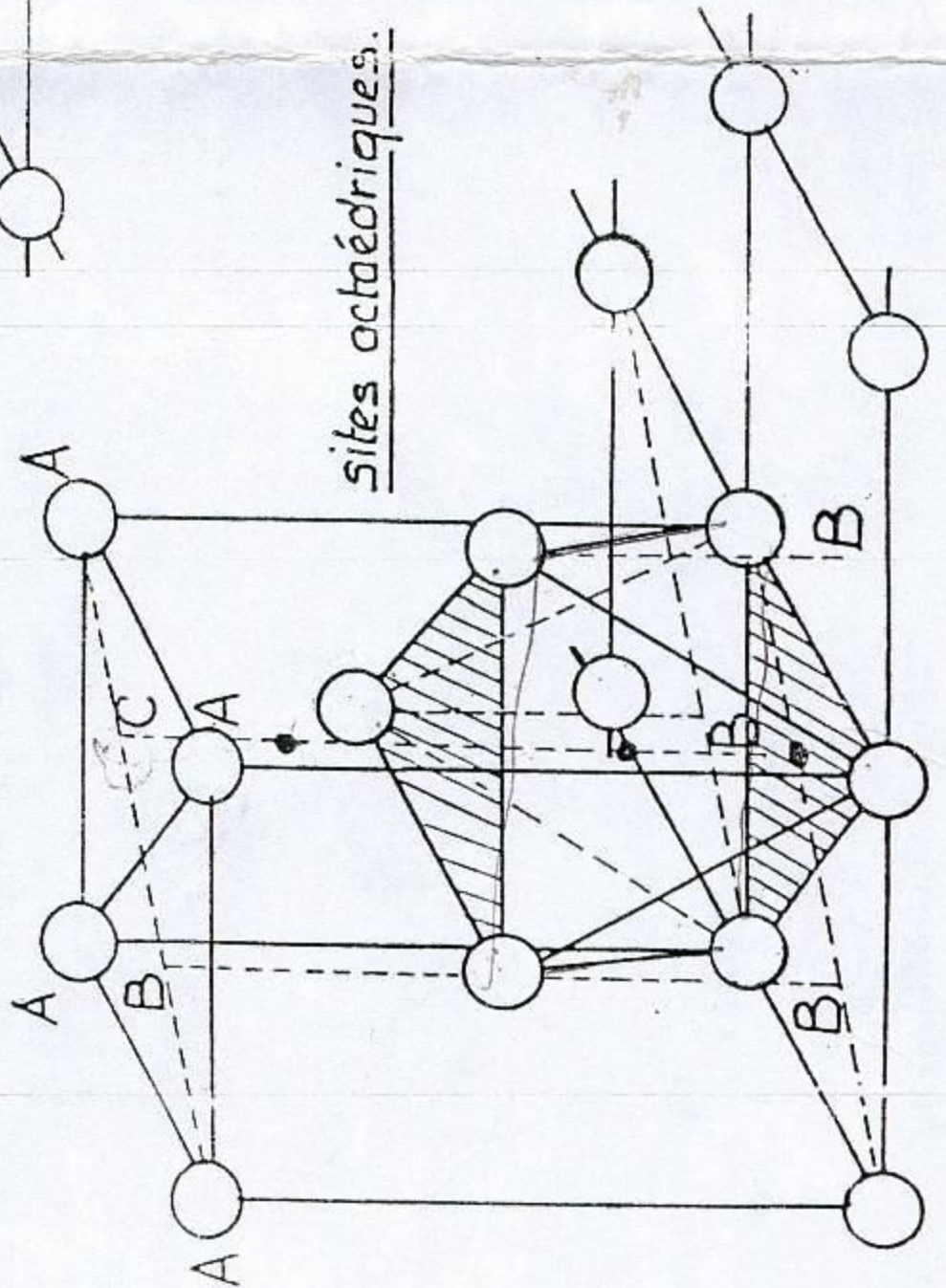
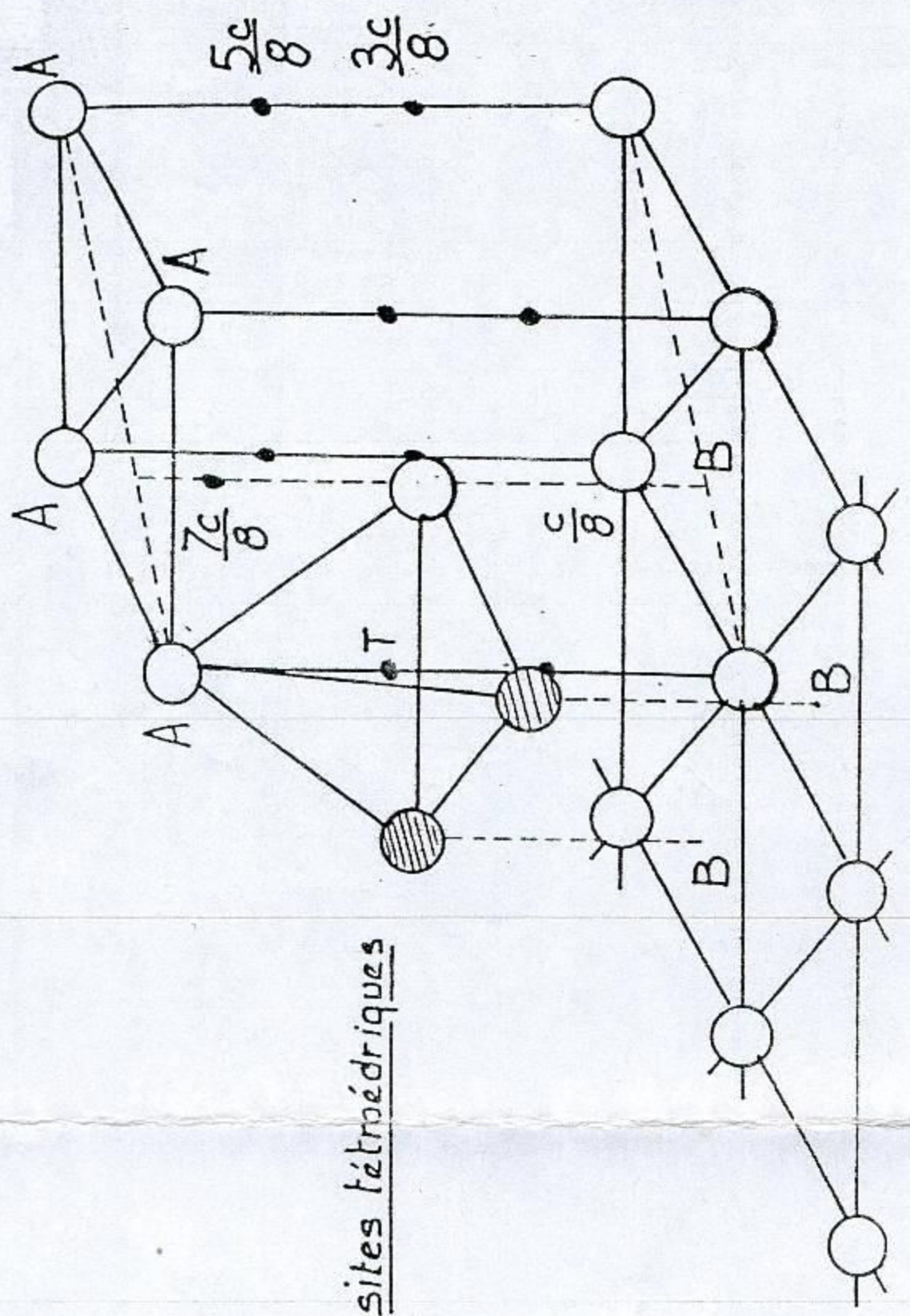


figure n° 3 : LOCALISATION DES SITES DANS LA STRUCTURE C. f. C.

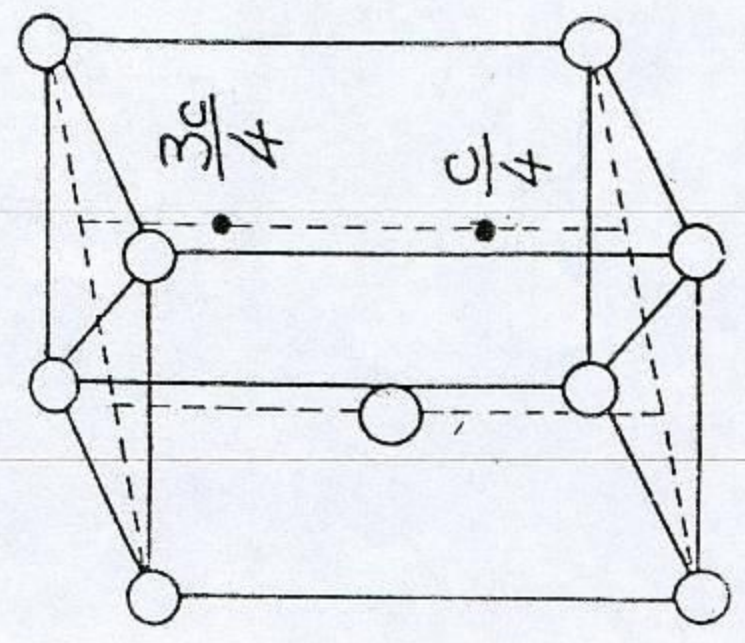
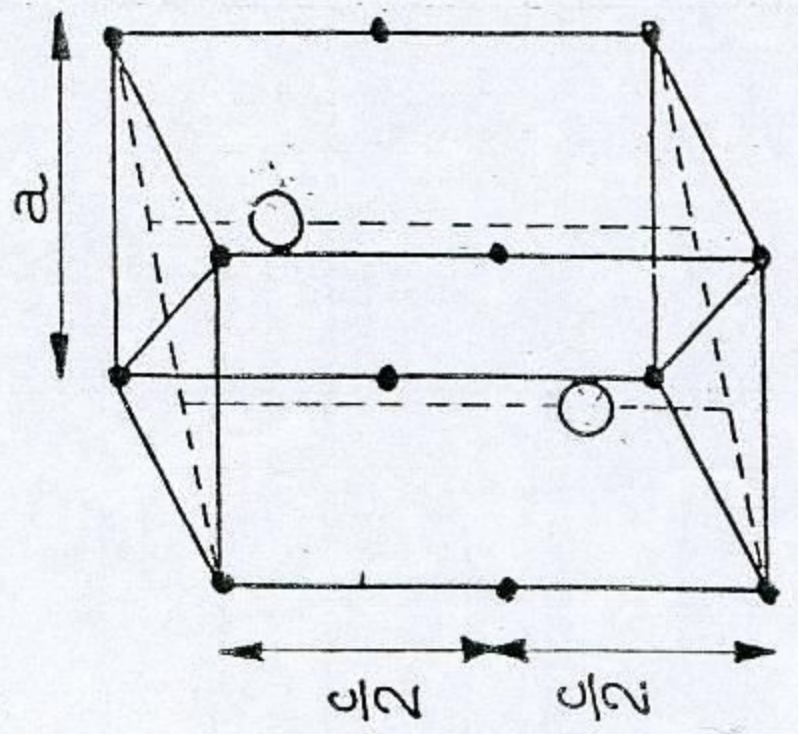




sites tétraédriques



sites octaédriques





- Les atomes sont situés aux sommets de la maille simple en position  $[000]$  et un atome à l'intérieur de la maille à mi-hauteur  $c/2$ . (La projection de cet atome sur le plan de base coïncide avec le centre de gravité du triangle  $\Delta$  en position  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ ).

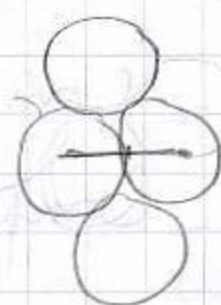
Nombre de motifs par maille:

$$n = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ atomes/mailles.}$$

Rayon atomique:

Le plan de densité maximale est le plan de base  $(001)$ . Les atomes sont en contact suivant le côté du losange d'où

$$2R = a \rightarrow R = \frac{a}{2}$$



Compacité =  $\frac{n \cdot V_{\text{sphère}}}{V_{\text{maille}}}$

$$n \cdot V_{\text{sphère}} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$V_{\text{maille}} = a b c \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

$$a = b = 2r \text{ et } c = f(r) ?$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \text{ et } \gamma = 120^\circ \Rightarrow V_{\text{maille}} = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$C = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{a}{c}; \text{ avec: } c = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a (\text{voir TD})$$

$$C = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{a}{\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$$

Remarque

1- la compacité de la structure h.c est bien identique à celle de la structure c.f.c. cette compacité (0,74) est la compacité maximale que l'on peut avoir dans tous les empilements.

2- Si  $\frac{c}{a} = 1,633 \rightarrow$  une structure h.c idéale.

3- Si  $\frac{c}{a}$  s'écarte légèrement en plus de la valeur 1,633, la structure h.c est allongée.

4- Si  $\frac{c}{a}$  s'écarte légèrement en moins de la valeur 1,633



La structure h. est aplatis.

Masse volumique:

$$\rho = \frac{2M}{\cancel{\alpha} \frac{a^2 \sqrt{3}}{2} \cdot c} = \frac{4M}{\cancel{\alpha} \cdot a^2 \cdot \sqrt{3} c}$$

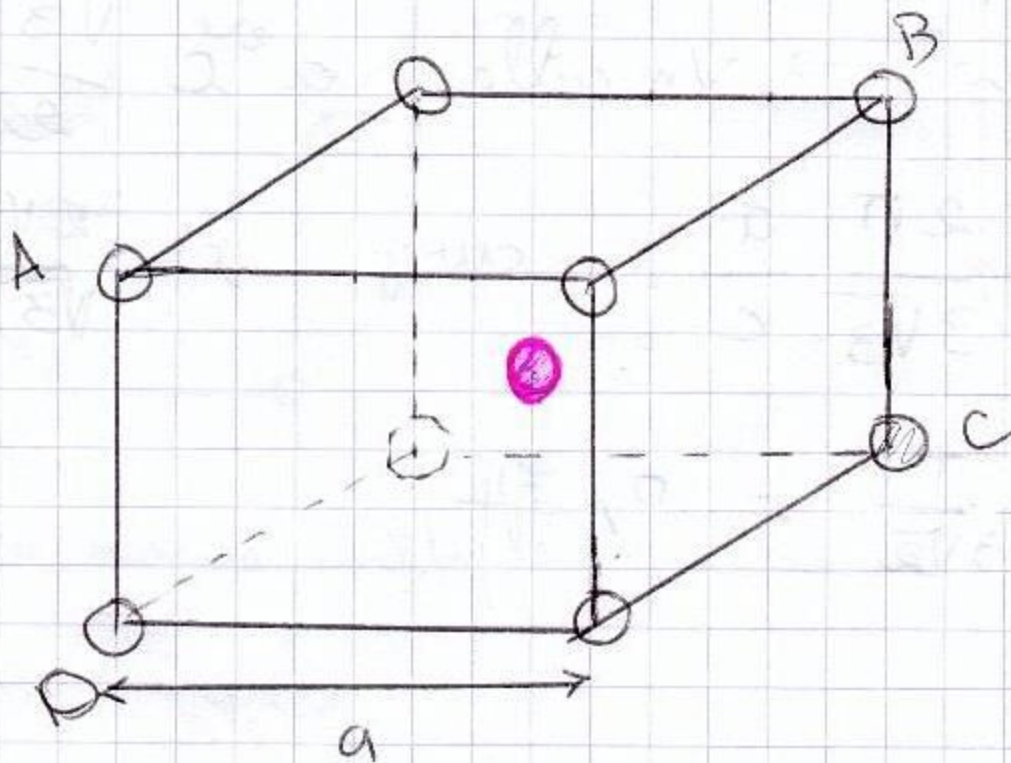
## I. Structures ioniques:

Les éléments du motif sont des ions (anions, cations) liés par des interactions ioniques. On distingue quatre types de composés ioniques:

- Composés ioniques AB (CsCl, NaCl, ZnS...)
- Composés AB<sub>2</sub> (CaF<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>O, TiO<sub>2</sub>...)
- Composés AB<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Co<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>)
- Composés AB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (structure spinelle MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)

### 1. Composés AB:

Exemple: Le chlorure de césium CsCl:



○ = Cl<sup>-</sup>

● = Cs<sup>+</sup>

- la maille est définie par un seul paramètre  $a$  = arête de la maille
- Le réseau du CsCl est cubique simple.
- la maille comporte un ion Cs<sup>+</sup> au centre en position  $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$  et des ions Cl<sup>-</sup> aux 8 sommets en positions  $[000]$  ou l'inverse.



## Indice de coordination :

chaque cation  $\text{Cs}^+$  est entouré de 8 anions et placés à  $\frac{a\sqrt{3}}{2}$  de celui-ci et inversement.

L'indice de coordination est de 8 aussi bien l'anion que pour le cation. On dit qu'on a une coordinance 8-8.

## Conditions de Stabilité

Soient  $R_A$  le rayon de l'anion et  $R_C$  celui du cation. le plan de densité maximale est le plan diagonal (A B C D).

Les ions sont en contact suivant la diagonale du cube (AC ou BD) d'où on a :

$$2(R_A + R_C) = a\sqrt{3} \quad \text{soit} \quad a = \frac{2}{\sqrt{3}}(R_A + R_C).$$

Les anions ne doivent pas empiéter l'un sur l'autre d'où la relation :  $2R_A \leq a$ .

Soit en tenant compte de la relation précédente :

$$2R_A \leq \frac{2}{\sqrt{3}}(R_A + R_C) \Rightarrow \frac{R_C}{R_A} \geq \sqrt{3} - 1$$

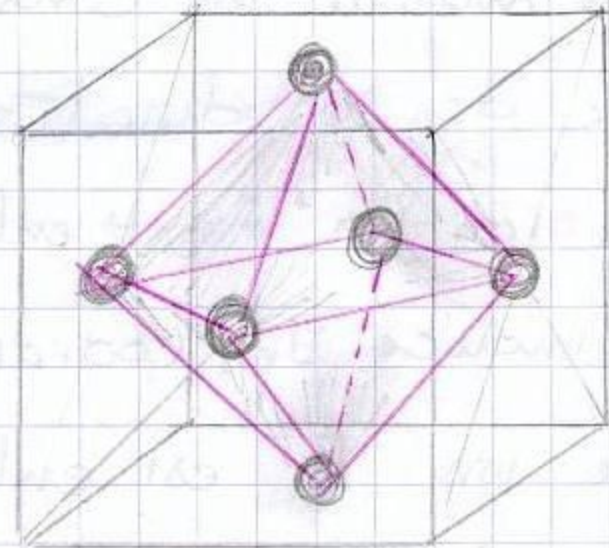
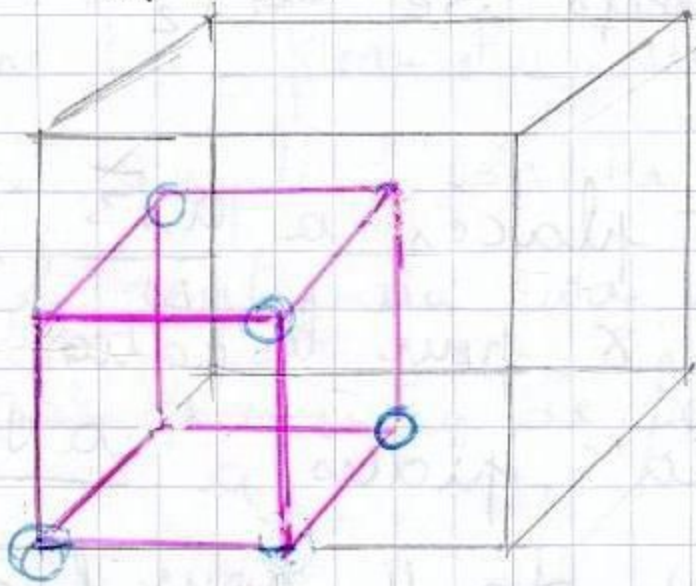
**NB :** en Général les anions sont plus volumineux que les cations

$$\Rightarrow \frac{R_C}{R_A} < 1$$

$$0,732 \leq \frac{R_C}{R_A} < 1$$

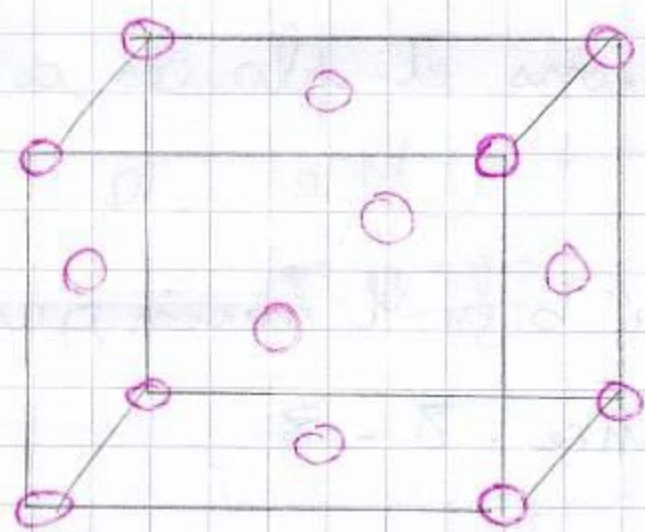
2. Type  $\text{AB}_2$  :

exp. Type fluorine  $\text{CaF}_2$ .

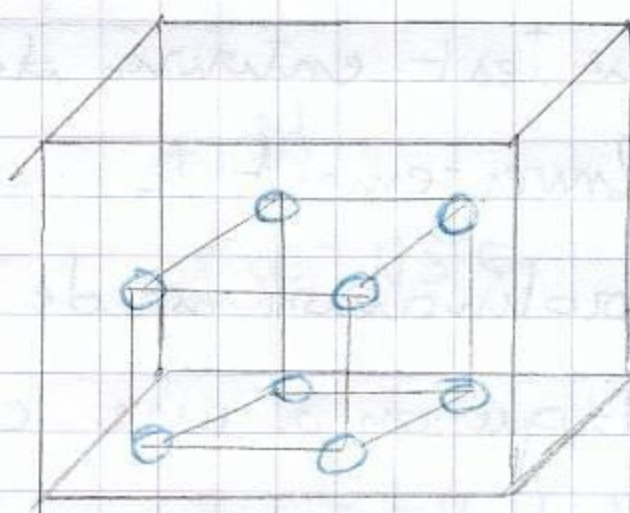


S.T : site Tetraédrique : C.F.C. C.O : site octaédrique

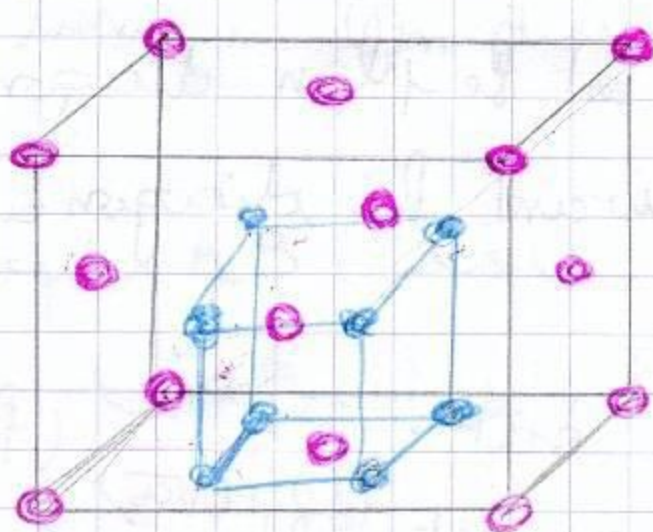




C.F.C :  $\text{Ca}^{++}$



$\text{F}^-$



$\text{F}^-$

$\text{Ca}^{++}$

- La maille est cubique mais la position du cation et de l'anion ne sont pas équivalentes.

- Les cations  $\text{Ca}^{++}$  sont disposés en C.F.C et les anions  $\text{F}^-$  occupent tous les sites tétraédriques de ce réseau (soit 8  $\text{F}^-$  par maille).

$$n_{\text{Ca}^{++}} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ cations.}$$



- Chaque maille est constituée de 4 motifs de  $\text{CaF}_2$ .

Indice de coordination :

- Chaque ion  $\text{Ca}^{++}$  est entouré de 8  $\text{F}^-$  placés à  $\frac{a\sqrt{3}}{4}$  de celui-ci ; l'indice de coordination est de 8 pour le cation.

- chaque ion  $\text{F}^-$  est entouré de 4  $\text{Ca}^{++}$  placés à  $\frac{a\sqrt{3}}{4}$  de celui-ci ; l'indice de coordination est de 4 pour l'anion.  
 $\Rightarrow$  la coordination est "8-4"



## condition de stabilité:

- Le plan de densité maximal est le plan diagonal.
  - L'anion et le cation sont en contact suivant la diagonale du cube d'où la relation :  $R_A + R_C = \frac{a\sqrt{3}}{4}$
- $$\Rightarrow a = \frac{4}{\sqrt{3}} (R_A + R_C) \quad \text{--- (1)}$$

- Les anions ne doivent pas empiéter l'un sur l'autre d'où la relation  $2 R_A \leq \frac{a}{2}$  --- (2)

d'où on a :

$$0,732 \leq \frac{R_C}{R_A} \leq 1$$

## Structure anti fluore:

- La structure anti fluore est identique à la structure fluore. Seule la position des cations et des anions sont inversées.

- Dans le type fluore A : cation, B : anion.

" " " anti " A : anion B : cation

la coordinance est : 4 - 8 dans le type anti-fluore.

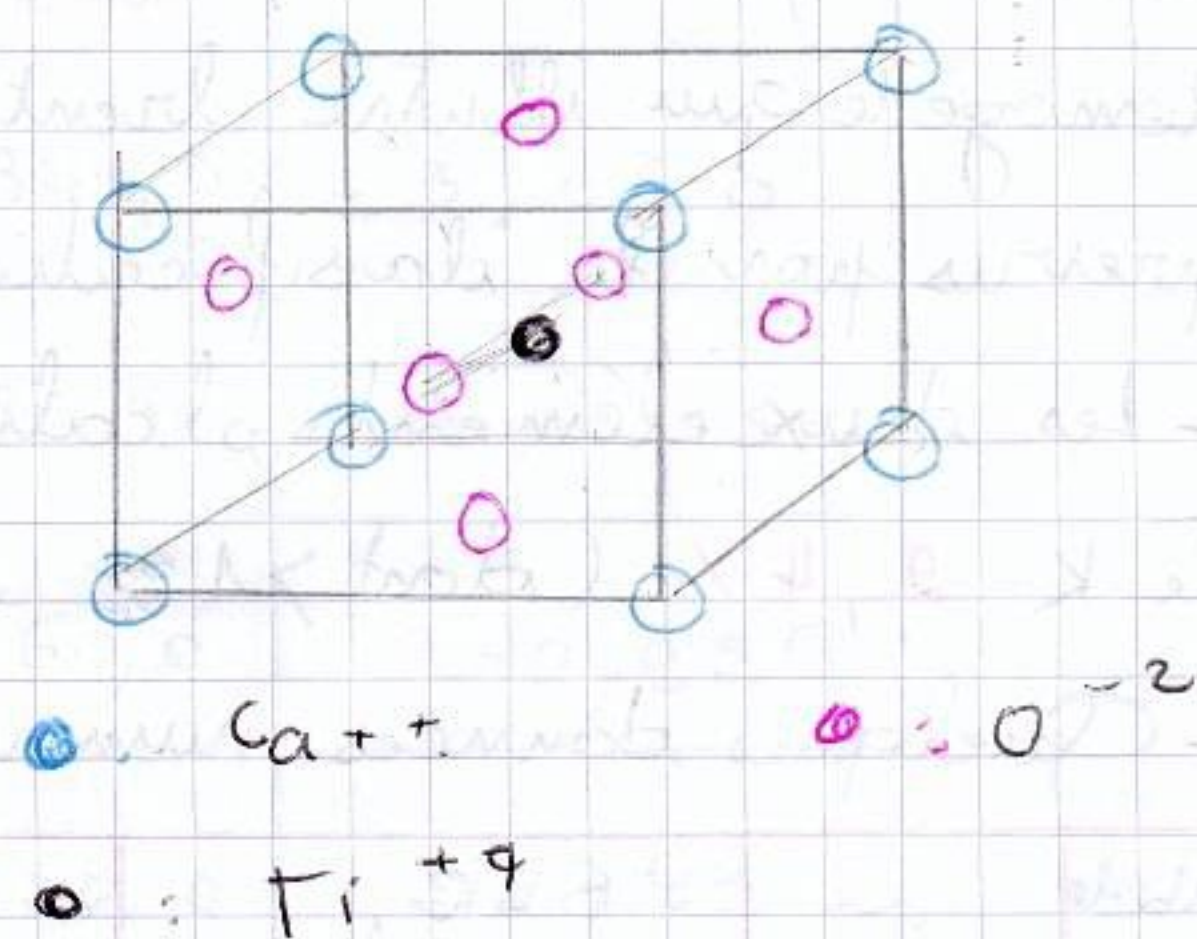
## 3. Type $ABO_3$ :

exemple :  $\text{CaTiO}_3$ .

la maille est cubique ; elle est définie par un seul paramètre  $a$  : arête du cube.

- Les ions  $\text{Ca}^{++}$  forment un réseau cubique simple, l'ion  $\text{Ti}^{+4}$

occupe le centre du cube, et les ions  $\text{O}^{2-}$  le centre des faces du cube.



## nombre de motif par maille :

$$n_{\text{Ca}^{++}} = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \quad \text{Ti}^{+4} = 1 \times 1 = 1$$

$$n_{\text{O}^{2-}} = 6 \cdot \frac{1}{2} = 3 \quad \Rightarrow 1 \text{ CaTiO}_3 / \text{maille}$$